

**DIAN INDRIYANI**

**UJI *IN SILICO* SENYAWA AKTIF DARI DAUN JAMBU  
MAWAR (*Syzygium jambos* (L.) Alston) SEBAGAI  
ANTICOVID-19**



**PROGRAM STUDI S1 FARMASI  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS GARUT  
2021**

**LEMBAR PENGESAHAN**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS GARUT**



**dr. Siva Hamdani, MARS., M.Farm.**

**UJI *IN SILICO* SENYAWA AKTIF DARI DAUN JAMBU  
MAWAR (*Syzygium jambos* (L.) Alston) SEBAGAI  
ANTICOVID-19**

**TUGAS AKHIR**

Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar  
Sarjana Farmasi pada Program Studi S1 Farmasi  
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam,  
Universitas Garut.

Garut, Januari 2021

Oleh:

**Dian Indriyani**  
**24041117192**

Disetujui Oleh:



**Dr. apt. Deden Winda Suwandi, M.Farm.**  
Pembimbing Utama



**apt. Selvira Anandia I.M, M.S.Farm.**  
Pembimbing Serta



Kutipan atau saduran, baik sebagian maupun seluruh naskah ini, harus menyebutkan nama pengarang dan sumber aslinya, yaitu Program Studi S1 Farmasi, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Garut.

## DEKLARASI

Dengan ini menyatakan bahwa tugas akhir dengan judul **“UJI *IN SILICO* SENYAWA AKTIF DARI DAUN JAMBU MAWAR (*Syzygium jambos* (L.) Alston) SEBAGAI ANTICOVID-19”** ini beserta seluruh isinya adalah benar-benar karya saya sendiri dan saya tidak melakukan penjiplakan atau pengutipan dengan cara-cara yang tidak sesuai dengan etika keilmuan yang tidak berlaku dengan masyarakat keilmuan. Atas pernyataan ini, saya siap menanggung resiko atau sanksi yang dijatuhkan kepada saya apabila kemudian ditemukan adanya pelanggaran terhadap etika keilmuan dalam karya ini, atau ada klaim dari pihak lain terhadap karya saya ini.

Garut, Juli 2021  
Yang membuat pernyataan  
Tertanda



**DIAN INDRIYANI**

# UJI *IN SILICO* SENYAWA AKTIF DARI DAUN JAMBU MAWAR (*Syzygium jambos* (L.) Alston) SEBAGAI ANTICOVID-19

Dian Indriyani  
24041117192

## ABSTRAK

*International Committee on Taxonomy of Viruses* memberikan nama virus covid-19 sebagai *Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus-2* (SARS-CoV-2). Reseptor yang digunakan berupa enzim Mpro (*Main Protease*) dengan kode protein 5R7Y, dimana enzim ini bekerja dengan cara berinteraksi secara langsung dengan *Angiotensin-Converting Enzyme 2* (ACE-2) sehingga virus dapat masuk kedalam sel target. Diketahui bahwa ekstrak dari daun jambu mawar dapat menghambat pertumbuhan virus. Tujuan penelitian ini yaitu memprediksi senyawa baru yang memiliki aktivitas antivirus sehingga dapat dijadikan sebagai salah satu kandidat obat untuk anticovid-19. Prediksi dilakukan secara *in silico* dengan metode *molecular docking*. Hasil penambatan molekul menunjukkan bahwa senyawa *4-Quinolinol-4-ethenyl-1-ethyldecahydro-2-methyl* memiliki afinitas baik terhadap enzim Mpro (*Main Protease*) dengan nilai  $\Delta G$  -5.09 Kkal/mol dan nilai KI 186.87 $\mu$ M sedangkan ligan alami menunjukkan nilai  $\Delta G$  -4.77 Kkal/mol dan nilai KI 321.51 $\mu$ M. Senyawa ini memiliki absorpsi dan distribusi yang baik dalam tubuh berdasarkan hasil yang didapat dari parameter *PreADME* serta memiliki sifat fisikokimia yang baik karena memenuhi semua parameter *Lipinski's Rule of Five*. Hasil pengujian profil toksisitas senyawa tersebut bersifat mutagenik tetapi negatif karsinogenik. Dapat disimpulkan bahwa penelitian dapat dilanjutkan dengan optimasi struktur senyawa *4-Quinolinol 4-ethenyl-1-ethyldecahydro-2-methyl* untuk menghilangkan sifat mutagenik sehingga dapat dikembangkan menjadi kandidat obat baru.

**Kata kunci:** daun jambu mawar (*Syzygium jambos* (L.) Alston), enzim Mpro, *molecular docking*, reseptor 5R7Y.

**IN SILICO STUDY OF ACTIVE COMPOUNDS OF ROSE  
GUAVA LEAVES (*Syzygium jambos* (L.) Alston)  
AS ANTICOID-19**

Dian Indriyani  
24041117192

**ABSTRACT**

*The International Committee on Taxonomy of Viruses named the covid-19 virus as severe acute respiratory syndrome coronavirus-2 (SARS-CoV-2). The receptor used is Mpro with protein code 5R7Y, where this enzyme works by interacting directly with Angiotensin-Converting Enzyme 2 (ACE-2) so that the virus can enter the target cell. Based on previous research, Rose Guava leaves extract can inhibit the growth of viruses. This study aimed to predict new compounds that had antiviral activity as one of the drug candidates for covid-19, using in silico study. The results of molecular docking showed that the compound 4-Quinololinol-4-ethenyl-1-ethyldecahydro-2-methyl had a good affinity for the enzyme Mpro (Main Protease) with  $\Delta G$  of -5.09 Kcal/mol and KI value of 186.87 $\mu$ M while natural ligands had  $\Delta G$  -4.77 Kcal/mol and KI values of 321.51 $\mu$ M. This compound had good absorption and distribution in the body based on the results obtained from PreADME parameters and had good physicochemical properties because it met all parameters of Lipinski's Rule of Five. The result of toxicity profile was mutagenic but negative carcinogenic. It was concluded that the research could be continued with optimization of the structure of 4-Quinololinol 4-ethenyl-1-ethyldecahydro-2-methyl to eliminate mutagenic property thus it could be developed into new drug candidates.*

**Keywords:** *rose guava leaf (*Syzygium jambos* (L.) Alston), Mpro enzyme, molecular docking, 5R7Y receptor*

## KATA PENGANTAR

Puji serta syukur penulis panjatkan kehadirat Allah SWT atas berkat rahmat, karunia dan hidayah-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan penyusunan Tugas Akhir yang berjudul **“UJI *IN SILICO* SENYAWA AKTIF DARI DAUN JAMBU MAWAR (*Syzygium jambos* (L.) Alston) SEBAGAI ANTICOVID-19”**. Penyusunan Tugas Akhir ini dimaksudkan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana pada Program Studi S1 Farmasi Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Garut.

Dalam penyusunan proposal ini tidak terlepas dari bantuan dan dukungan dari berbagai pihak, baik secara moril maupun materil. Untuk itu dengan segala kerendahan hati penulis ingin menyampaikan ucapan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada:

1. dr. Siva Hamdani, MARS., M.Farm. selaku Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Garut.
2. Niknik Handayani, M.Si., selaku wali dosen yang senantiasa memberikan bimbingan dan motivasi kepada penulis sejak mulai memasuki perkuliahan.
3. Dr. apt. Deden Winda Suwandi, M.Farm. selaku dosen pembimbing utama yang telah memberikan arahan serta bimbingan dengan penuh rasa tanggung jawab dan motivasi yang besar kepada penulis selama proses penyusunan penelitian ini, sehingga penelitian dapat diselesaikan.

4. apt. Selvira Anandia I.M, M.S.Farm. selaku pembimbing serta yang telah bersedia meluangkan waktu memberikan bimbingan, saran, nasihat kepada penulis selama proses penyusunan penelitian ini, sehingga penelitian dapat diselesaikan.
5. Seluruh dosen dan staff Prodi Farmasi Universitas Garut yang turut serta membantu demi kelancaran penyusunan penelitian ini.
6. Kedua orang tua Ibunda Siti Rokayah dan Ayahanda Ujang Suherman, Kakak dan Adik tercinta atas do'a, motivasi, dukungan, dan ridhonya untuk penulis dalam menyelesaikan penyusunan penelitian ini. Semoga Allah SWT selalu memberikan kesehatan dan lindungan kepada Ibunda, Ayahanda, Kakak serta Adik tercinta.
7. Rekan-rekan terhebat satu bidang farmakologi: Eneng Marlina dan Zhalzha Ismi Wijaya yang sama-sama berjuang menyelesaikan penelitian ini.
8. Rekan-rekan sekaligus sahabat seperjuangan: Desti Khoirunnisa Ramadhan, Elianika Millen Putrisa, Novi Amirul Janah dan Pitri Kasanopa yang sama-sama berjuang dan senantiasa membantu serta memberikan motivasi dan solusi kepada penulis.
9. Rekan-rekan Farmasi angkatan 2017, khususnya Farmasi D yang telah memberikan keceriaan, motivasi, semangat dan telah membantu penulis dalam penyusunan penelitian ini.

10. Aaliya Naula Rabbi, Dede Rika dan Deni Ilham Fadilah selaku sahabat karib yang telah memberikan motivasi, semangat serta nasehat kepada penulis.

11. Semua pihak yang tidak dapat penulis sebutkan satu-persatu yang turut memberikan bantuan dan dorongan kepada penulis dalam menyelesaikan penelitian ini.

Semoga Allah SWT memberikan pahala yang berlipat ganda kepada semua pihak yang telah memberikan do'a, bimbingan, semangat dan support kepada penulis dalam penyusunan penelitian ini.

Penulis menyadari sepenuhnya bahwa dalam penulisan proposal penelitian ini masih banyak kekurangan, oleh karena itu kritik dan saran yang membangun dari pembaca sangat penulis harapkan. Akhir kata semoga penelitian ini dapat memberikan manfaat khususnya bagi penulis dan umumnya bagi pembaca.

Garut, Januari 2021

Penulis

## DAFTAR ISI

	Halaman
KATA PENGANTAR .....	i
DAFTAR ISI.....	iv
DAFTAR LAMPIRAN.....	vii
DAFTAR GAMBAR.....	viii
DAFTAR TABEL.....	ix
<b>BAB</b>	
I PENDAHULUAN.....	1
II TINJAUAN PUSTAKA.....	4
2.1 Tinjauan Botani.....	4
2.1.1 Klasifikasi Tanaman .....	4
2.1.2 Sinonim .....	4
2.1.3 Nama Daerah.....	5
2.1.4 Morfologi Tanaman .....	5
2.1.5 Ekologi dan Penyebaran.....	6
2.1.6 Kandungan Kimia .....	7
2.1.7 Efek Farmakologi.....	8
2.2 Deskripsi Penyakit .....	8
2.2.1 Definisi Covid-19.....	8
2.2.2 Patogenesis.....	9
2.2.3 Manifestasi Klinis .....	10
2.2.4 Penyebaran .....	12

2.2.5	Terapi Farmakologi.....	13
2.3	In Silico.....	16
2.4	Reseptor .....	16
2.5	Asam Amino .....	17
2.6	Enzim.....	17
2.7	Penambatan Molekul .....	17
2.8	<i>Lipinski's Rule of Live</i> .....	18
2.9	<i>Pre-ADMET</i> .....	18
III	METODE PENELITIAN.....	19
IV	PENELITIAN.....	21
4.1	Alat.....	21
4.1.1	Perangkat Keras .....	21
4.1.2	Perangkat Lunak .....	21
4.2	Bahan .....	21
4.3	Prosedur Kerja .....	22
4.3.1	Preparasi Makromolekul .....	22
4.3.2	Preparasi Ligan .....	23
4.3.3	Validasi Metode .....	24
4.3.4	Penambatan Molekul.....	24
4.3.5	Analisis dan Visualisasi Penambatan Molekul .....	26
4.3.6	Pengujian <i>Pre-ADME</i> dan Toksisitas .....	26
4.3.7	Pengujian <i>Lipinski's Rule of Five</i> .....	27
V	HASIL DAN PEMBAHASAN .....	28

VI	KESIMPULAN DAN SARAN .....	38
6.1	Kesimpulan .....	38
6.2	Saran .....	38
	DAFTAR PUSTAKA.....	39
	LAMPIRAN .....	45



## DAFTAR LAMPIRAN

LAMPIRAN	Halaman
1 Alur Penelitian.....	45
2 Tanaman Daun Jambu Mawar.....	47
3 Struktur 3D Reseptor.....	48
4 Struktur Ligan Alami.....	49
5 Struktur 2D Senyawa Uji.....	50
6 Validasi Metode.....	56
7 Hasil Penambatan Molekul.....	58
8 Hasil Pengujian <i>Lipinski's Rule of Five</i> .....	61
9 Hasil Pengujian <i>PreADME</i> .....	65
10 Hasil Pengujian Toksisitas.....	69

## DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
I.1 Alur Penelitian .....	45
I.2 Analisis <i>Pre-ADME</i> dan Toksisitas .....	46
I.3 Analisis <i>Lipinski's Rule of Five</i> .....	46
II.1 Tanaman Daun Jambu Mawar .....	47
III.1 Struktur 3D Reseptor.....	48
III.2 Struktur Ligan Alami .....	49
IV.1 Hasil visualisasi tumpang tindih ligan alami Enzim Mpro dari hasil kristalografi sinar-X (Merah) dengan ligan hasil <i>redocking</i> (Biru) .....	56
IV.2 Hasil visualisasi interaksi ligan alami dengan Enzim Mpro .....	56

## DAFTAR TABEL

Tabel		Halaman
V.1	<i>Grid Box</i> , <i>RMSD</i> , Nilai Ikatan Energi dan Nilai Konstanta Inhibisi Ligan Alami .....	30
V.2	Hasil Penambatan Molekul dari Ligan Alami dan Senyawa Uji .....	31
V.3	Sifat Fisikokimia Senyawa yang Terkandung dalam Daun Jambu Mawar Berdasarkan 5 Aturan <i>Lipinski's Rule of Five</i> .....	34
V.4	Uji <i>PreADME</i> (Absorpsi dan Distribusi) .....	36
V.5	Uji Toksisitas .....	37
I.1	Struktur Senyawa Uji .....	50