

**ANALISIS AKTIVITAS SENYAWA HERBAL ASLI INDONESIA
SEBAGAI ANTI-SARS-COV-2 DENGAN KOMORBID DIABETES
SECARA *IN SILICO***

Safira Yulita Fazadini, Program Studi Magister Farmasi, 2022
Pembimbing : (I) Dr. Farida Suhud M.Si., Apt (II) Dr. Dra. Azminah M.Si.

ABSTRAK

Data Kemenkes RI menunjukkan sebanyak 36.5% pasien COVID-19 beserta komorbid diabetes memiliki angka kematian 9,4% lebih tinggi dibanding dengan komorbid hipertensi, penyakit jantung dan ginjal. Salah satu cara untuk mencegah penyebaran COVID-19 adalah dengan vaksinasi, tetapi belum mencapai target 100% karena stigma masyarakat tentang efek samping penggunaan vaksin dan sebanyak 70% masyarakat Indonesia masih mempercayai manfaat pengobatan herbal. Indonesia berpotensi besar untuk pengembangan pemanfaatan herbal. BPOM dan beberapa penelitian yang telah dilakukan menyarankan pemanfaatan herbal sebagai antivirus yaitu Bawang Putih, Kunyit, Temulawak, Jahe, Daun Jambu Biji, Meniran, Sambiloto, Seledri, Kumis Kucing, dan Mengkudu. Kemenkes RI menyarankan herbal sebagai antivirus dan antidiabetes yaitu Kayu Manis, Pare, Daun Salam dan Brotowali. Tujuan penelitian ini untuk mengetahui potensi aktivitas senyawa herbal yang disarankan oleh BPOM dan Kemenkes sebagai target pengembangan obat herbal baru anti-SARS-CoV-2 dan antidiabetes dengan waktu yang cepat. Metode penelitian yaitu melihat sifat fisikokimia, parameter *druglikeness*, bioavailabilitas, dan toksisitas senyawa secara *In Silico* serta analisis aktivitas dengan metode Molecular Docking (Autodock-Vina). Reseptor yang digunakan yaitu SARS-Cov-2 Mpro (PDB ID : 7MPB) dan *RNA Dependent RNA Polymerase* (PDB ID : 7DFG) sebagai anti-SARS-CoV-2 serta DPP-4 (PDB ID : 7KBY) sebagai Antidiabetes. Hasil menunjukkan terdapat senyawa terbaik yang memenuhi parameter *druglikeness*, bioavailabilitas, toksisitas serta nilai binding energy yang kecil yaitu *Celeroside* dari Seledri, *Neoandrographolide* dari Sambiloto dan *Tinocordifoliside* dari Brotowali. Hasil penelitian ini diharapkan menjadi dasar penelitian lebih lanjut untuk pendekatan *in vitro* dan *in vivo*.

Kata Kunci : *In Silico*, *Molecular Docking*, Senyawa Herbal, Anti-SARS-CoV-2, Antidiabetes

**ACTIVITY ANALYSIS OF ORIGINAL INDONESIAN HERBAL
COMPOUNDS AS ANTI-SARS-COV-2 WITH COMBID DIABETES WITH
IN SILICO METHOD**

Safira Yulita Fazadini, Master of Pharmacy Study Program, 2022
Supervisor : (I) Dr. Farida Suhud M.Sc., Apt (II) Dr. Dra. Azminah M.Si.

ABSTRACT

The Ministry of Health of the Republic of Indonesia data shows that as many as 36.5% of COVID-19 patients and their comorbid diabetes have a 9.4% higher mortality rate compared to comorbid hypertension, heart and kidney disease. One way to prevent the spread of COVID-19 is by vaccination, but it has not yet reached 100% target, due to public stigma about the side effects of using vaccines, and as many as 70% of Indonesian people still believe in the benefits of herbal medicine. Indonesia has great potential for the development of herbal use. BPOM and several studies that have been conducted suggest the use of herbs as antivirals, namely Garlic, Turmeric, Temulawak, Ginger, Guava Leaves, Meniran, Sambiloto, Celery, Cat's Mustache, and Noni. Kemenkes RI recommends herbs as antiviral and antidiabetic namely Cinnamon, Pare, Salam Leaves and Brotowali. The purpose of this study was to determine the potential activity of herbal compounds suggested by BPOM and Kemenkes RI as targets for developing new anti-SARS-CoV-2 and antidiabetic herbal medicines in a short time. The research method is to look at the physicochemical properties, druglikeness parameters, bioavailability, and toxicity of compounds using In Silico and activity analysis using the Molecular Docking (Autodock-Vina) method. The receptors used were SARS-Cov-2 Mpro (PDB ID: 7MPB) and RNA Dependent RNA Polymerase (PDB ID: 7DFG) as anti-SARS-CoV-2 and DPP-4 (PDB ID: 7KBY) as antidiabetic. The results showed that the best compounds that met the parameters of druglikeness, bioavailability, toxicity and low binding energy values were Celeroside from Celery, Neoandrographolide from Sambiloto and Tinocordifoliside from Brotowali. The results of this study are expected to be the basis for further research for in vitro and in vivo approaches.

Keyword : In Silico, Molecular Docking, Indonesia Herbal Compound, Anti-SARS-CoV-2, Antidiabetes