

Universitas Ngudi Waluyo
Program Studi Farmasi, Fakultas Kesehatan
Skripsi, 2021
Ika Fajrin Kurniapuspa Aryanti
052191133

STUDI *IN SILICO* SENYAWA *QUERCETIN* TERHADAP RESEPTOR PLpro, 3CLpro dan NSP3 SEBAGAI KANDIDAT ANTIVIRUS SARS-CoV-2

xviii + 79 halaman + 13 gambar + 9 tabel + 9 lampiran

ABSTRAK

Latar Belakang : Pandemi *Covid-19* yang terjadi saat ini dapat diklasifikasikan sebagai kondisi kedaruratan atau bencana global dan menyebabkan angka kematian tinggi. Senyawa *Quercetin* diduga dapat digunakan sebagai antivirus, dengan mencegah sintesis dan replikasi RNA Virus membentuk ikatan dengan protein 3CLpro, PLpro, dan NSP3. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk menganalisa potensi *Quercetin* sebagai *inhibitor* 3CLpro, PLPro, dan NSP3 pada SARS-CoV-2 melalui *molecular docking*.

Metode : Penelitian eksperimental dilakukan dengan cara analisis *in silico* melalui sistem komputasi *molecular docking* terhadap senyawa *Quercetin* sebagai kandidat antivirus Covid-19 terhadap 3CLpro, PLpro dan NSP3 menggunakan *software* PLANTS dan YASARA.

Hasil : Nilai validasi ligand *native* RMSD $< 2.0 \text{ \AA}$ pada ketiga protein 3CLpro, PLpro, dan NSP3, dan dihasilkan skor *docking* ligand *native* dan senyawa *Quercetin* terhadap protein pada kode PDB 5R7Y yakni $(-62,25 \pm 1,52)$ dan $(-70,359 \pm 0,31)$, kode PDB 3E9S yakni $(-110,3349 \pm 0,48)$ dan $(-79,1542 \pm 1,12)$, serta kode PDB 6WOJ yakni $(-136,1779 \pm 2,03)$ dan $(-87,3134 \pm 0,82)$. Hasil uji ANNOVA $p < 0,001$ dan Uji *Post Hoc* $p < 0,001$ yang menunjukkan ada perbedaan skor *docking* secara signifikan.

Kesimpulan : Senyawa *Quercetin* mampu berikatan dengan asam amino pada protein 3CLpro, PLpro, dan NSP3, dan memiliki perbedaan skor *docking* diantara ketiganya. Namun ikatan yang lebih poten yaitu senyawa *Quercetin* dengan protein 3CLpro yang ditunjukkan dengan hasil rata-rata skor *docking* *Quercetin* lebih rendah dari ligand *native*, sehingga dapat dikatakan sebagai kandidat antivirus Covid-19.

Kata Kunci : *Quercetin*, *Inhibitor* SARS-CoV-2, *In Silico*

Kepustakaan : 39 (1988 – 2021)

Universitas Ngudi Waluyo
Program Studi Farmasi, Fakultas Kesehatan
Skripsi, 2021
Ika Fajrin Kurniapuspa Aryanti
052191133

**IN SILICO STUDY OF QUERCETIN COMPOUNDS ON PLpro, 3CLpro
and NSP3 RECEPTORS AS CANDIDATE ANTIVIRUS SARS-CoV-2**

xviii + 79 pages + 13 pictures + 9 tables + 9 attachments

ABSTRACT

Background : The current Covid-19 pandemic can be classified as a global emergency or disaster and causes a high mortality rate. Quercetin compound is thought to be used as an antiviral, by preventing the synthesis and replication of RNA Virus forming bonds with 3CLpro, PLpro, and NSP3 proteins. The purpose of this study was to determine the potential of Quercetin as an inhibitor of 3CLpro, PLpro, and NSP in SARS-CoV-2 through molecular docking.

Methods : Experimental research was carried out by means of in silico analysis through a molecular docking computing system for Quercetin compounds as a candidate for the Covid-19 antiviral against 3CLpro, PLpro and NSP3 using PLANTS and YASARA software.

Results : The value of native ligand validation RMSD $< 2.0 \text{ \AA}$ in the three proteins 3CLpro, PLpro, and NSP3, and the resulting docking scores for native ligands and Quercetin compounds against the protein code PDB's 5R7Y are $(-62,25 \pm 1,52)$ and $(-70,359 \pm 0,31)$, protein code PDB's 3E9S are $(-10,3349 \pm 0,48)$ and $(-79,1542 \pm 1,12)$, and protein code PDB's 6WOJ are $(-136,1779 \pm 2,03)$ and $(-87,3134 \pm 0,82)$. The results of the ANNOVA test $p < 0.001$ and Post Hoc test $p < 0.001$ showed that there was a significant difference in docking scores.

Conclusion : Quercetin compounds are able to bind to amino acids in 3CLpro, PLpro, and NSP3 proteins, and have different docking scores between the three. However, a more potent bond is Quercetin compound with 3CLpro protein which is indicated by the average result of Quercetin docking score being lower than the native ligand, so it can be said as a candidate for Covid-19 antiviral.

Key Words : Quercetin, inhibitor SARS-CoV-2, in silico

Literature : 39 (1988 – 2021)