

# MEKANISME AKSI SENYAWA BIOAKTIF PADA BEBERAPA TUMBUHAN HERBAL ZINGIBERACEAE MENGGUNAKAN TEKNOLOGI MOLEKULER DOCKING PADA BEBERAPA MAIN PROTEASE (M<sub>PRO</sub>) SARS-COV-2

Oleh: Nurfina Aznam, Retno Arianingrum, Sri Atun, M.Si.

## ABSTRAK

Coronavirus adalah keluarga besar virus yang menyebabkan penyakit mulai dari flu biasa hingga penyakit yang lebih parah seperti sebagai sindrom pernapasan Timur Tengah (MERS-CoV) dan sindrom pernapasan akut parah (SARS-CoV). Corona virus merupakan penyakit menular, dengan penyebaran yang cepat dan luas, serta belum ditemukan obat yang efektif digunakan untuk membunuh virus tersebut. Obat antivirus yang digunakan saat ini seperti remdesivir, ritonavir, maupun kloroquin, masih menunjukkan kemanjuran yang terbatas dan memiliki efek samping yang serius. **Permasalahan penelitian** ini adalah untuk menentukan senyawa bioaktif dari tumbuhan herbal famili Zingiberaceae, seperti kunyit (*Curcuma longa*), temulawak (*Curcuma xanthorrhiza*), dan jahe (*Zinger officinale*) yang potensial dapat dikembangkan sebagai anticovid-19, serta mengetahui bagaimana mekanisme aktivitas dari senyawa bioaktif tersebut dalam melawan virus secara molekuler docking. **Tujuan** dari penelitian ini adalah untuk menentukan senyawa bioaktif yang potensial dari beberapa ekstrak herbal yang telah digunakan secara empiris oleh masyarakat sebagai anti covid-19, serta mengetahui mekanisme aktivitas menggunakan teknologi skrining virtual komputer melalui docking molekuler dan dinamika molekuler menggunakan beberapa reseptor protein virus Covid-19 yang terdapat pada data based RCSB PDB Database ([www.rcsb.org](http://www.rcsb.org)). **Metode:** Penelitian ini diawali dengan studi literatur untuk mencari senyawa bioaktif yang telah ditemukan pada tumbuhan kunyit, temulawak, dan jahe melalui Pubchem dan mendownload struktur molekulnya (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>). Molecular docking dilakukan dengan menggunakan program komputer PyRx (basis AutoDock, Vina, dan OpenBabel). Reseptor yang dipilih merupakan reseptor yang menargetkan penghambatan pada protease utama (M<sub>PRO</sub>) SARS-CoV-2 (PDB 6w63; PDB 6y2f; PDB 7vlq) yang merupakan bagian penting dari siklus hidup virus Covid-19. Struktur reseptor dapat diperoleh melalui website RCSB PDB Database ([www.rcsb.org](http://www.rcsb.org)). Hasil yang diharapkan dari penelitian ini dapat ditentukan mekanisme aktivitas dari senyawa bioaktif dari tumbuhan herbal sebagai anti COVID-19 yang potensial dipilih dan dievaluasi penyerapannya, distribusi, metabolisme dan ekskresi (ADME) dan aturan Lipinski. **Target dari penelitian** ini adalah dapat dipublikasikan minimal 1 artikel jurnal yang dipublikasikan dalam jurnal internasional bereputasi, seperti Molekul scopus Q3. Penelitian ini merupakan penelitian dasar dengan Tingkat kesiapan teknologi saat ini pada TKT 1 dan diharapkan diakhir penelitian pada TKT 2.

Kata Kunci: *molekular docking; in siliko; protein virus; Covid-19; jahe; kunyit; temulawak*