

**ANALISIS *IN SILICO* INTERAKSI SENYAWA  
KURKUMINOID TERHADAP ENZIM *MAIN  
PROTEASE 6LU7* DARI *SARS-COV-2***

**SKRIPSI**

Diajukan Untuk Memenuhi Salah Satu Syarat  
Mencapai Gelar Sarjana Farmasi  
Program Studi Farmasi  
Universitas Sahid Surakarta



Disusun oleh :

**ANGKININTA AYU WINIH KINASIH  
NIM. 2020143001**

**PROGRAM STUDI FARMASI  
FAKULTAS SAINS, TEKNOLOGI, DAN KESEHATAN  
UNIVERSITAS SAHID SURAKARTA  
2023**

**LEMBAR PERSETUJUAN**

**ANALISIS *IN SILICO* INTERAKSI SENYAWA  
KURKUMINOID TERHADAP ENZIM *MAIN*  
*PROTEASE 6LU7* DARI *SARS-COV-2***

Disusun Oleh:

**ANGKININTA AYU WINIH KINASIH  
NIM. 2020143001**

Skripsi ini telah disetujui untuk dipertahankan  
di hadapan Dewan Penguji  
pada tanggal 10 Juli 2023

**Pembimbing I**



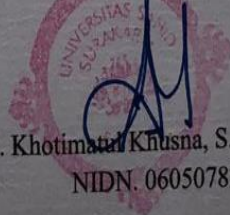
apt. Ahwan, S. Farm., M. Sc  
NIDN. 0626088401

**Pembimbing II**



Fadilah Qonitah S. Pd., M. Sc  
NIDN. 0612129002

Mengetahui,  
Ka.Prodi Farmasi



apt. Khotimatul Khusna, S. Farm., M. Sc  
NIDN. 0605078703

## LEMBAR PENGESAHAN

### ANALISIS *IN SILICO* INTERAKSI SENYAWA KURKUMINOID TERHADAP ENZIM *MAIN* *PROTEASE 6LU7* DARI *SARS-COV-2*

Disusun Oleh:

**ANGKININTA AYU WINIH KINASIH**  
**NIM. 2020143001**

Skripsi ini telah diterima dan disahkan oleh  
Dewan Penguji Skripsi  
Program Studi Farmasi Universitas Sahid Surakarta  
pada hari Senin tanggal 10 Juli 2023

Dewan Penguji:


1. Penguji 1 : apt. Ahwan, S. Farm., M. Sc  
NIDN. 0626088401
2. Penguji 2 : Fadilah Qonitah, S. Pd., M. Sc  
NIDN. 0612129002
3. Penguji 3 : apt. Reni Ariastuti, M. Sc  
NIDN. 0618018901

(.....)  
(.....)  
(.....)

Mengetahui,

Ka.Prodi Farmasi

Dekan  
Fakultas Sains, Teknologi, dan Kesehatan

  
apt. Khotimatul Khusna, S.Farm., M.Sc  
NIDN. 0605078703

  
Firdhaus Hari S.A.H., S.T., M. Eng  
NIDN. 0614068201

**LEMBAR PERNYATAAN**  
**ORISINALITAS KARYA ILMIAH**

---

Saya Mahasiswa Program Studi Farmasi Universitas Sahid Surakarta yang bertanda tangan di bawah ini:

**Nama : Angkininta Ayu Winih Kinasih**

**NIM : 202013001**

Menyatakan dengan sesungguhnya bahwa skripsi

**Judul : Analisis *In Silico* Interaksi Senyawa Kurkuminoid Terhadap Enzim  
*Main Protease 6LU7* Dari *Sars-Cov-2***

Adalah benar-benar karya yang saya susun sendiri. Apabila terbukti bahwa saya ternyata melakukan tindakan menyalin dan atau meniru tulisan karya orang lain, seolah-olah hasil pemikiran saya sendiri, saya bersedia menerima sanksi sesuai peraturan yang berlaku di Universitas termasuk pencabutan gelar yang telah saya peroleh.

Demikian surat pernyataan ini saya buat dengan sebenar-benarnya dan apabila dikemudian hari terbukti melakukan kebohongan, maka saya sanggup menanggung segala konsekuensinya.

Surakarta, 10 Juli 2023

Yang menyatakan



Angkininta Ayu Winih Kinasih

NIM. 2020143001

**LEMBAR PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI  
KARYA ILMIAH UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS**

---

Sebagai civitas Akademik Universitas Sahid Surakarta, saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Angkininta Ayu Winih Kinasih

NIM : 2020143001

Program Studi : Farmasi

Fakultas : Sains, Teknologi, dan Kesehatan

Jenis Karya : Skripsi

Demikian pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Universitas Sahid Surakarta hak bebas royalti noneksklusif (*Non-exclusive royalty Free Right*) atas skripsi saya yang berjudul :

“Analisis *In Silico* Interaksi Senyawa Kurkuminoid Terhadap Enzim *Main Protease 6LU7* Dari *Sars-Cov-2*”

Beserta instrument/desain, Perangkat (jika ada). Berhak menyimpan, mengalihkan bentuk, mengalihmediakan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (*database*), merawat serta mempublikasikan karya ilmiah saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis (*autor*) dan pembimbing sebagai *co autor* atau pencipta dan juga sebagai pemilik hak cipta.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sesungguhnya secara sadar tanpa paksaan dari pihak manapun.

Surakarta, 10 Juli 2023

Yang membuat pernyataan



Angkininta Ayu Winih Kinasih

NIM. 2020143001

## **MOTTO**

“Bangun Kesuksesan Dari Kegagalan. Keputusan Dan Kegagalan Adalah Dua Batu Loncatan Yang Paling Baik Menuju Kesuksesan”

-Dale Carnegie

## **HALAMAN PERSEMBAHAN**

Skripsi ini saya persembahkan untuk mama saya tercinta yaitu Ibu Dian Kuncaraning Ratih serta para adik yang telah memberikan kasih sayang, doa, dukungan moral maupun materil, motivasi serta nasehatnya yang membuat semangat dalam menyelesaikan skripsi ini

Dan diri saya sendiri yang telah berjuang hingga detik ini

## KATA PENGANTAR

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Allah SWT yang telah melimpahkan rahmat dan hidayah-Nya kepada penulis sehingga dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul Analisis *In Silico* Interaksi Senyawa Kurkuminoid Terhadap Enzim *Main Protease 6LU7* dari SARS-CoV-2.

Penulis menyadari bahwa dalam penyusunan dan penulisan skripsi ini tidak akan terwujud tanpa adanya bantuan, dukungan serta dorongan dari berbagai pihak, maka pada kesempatan ini penulis mengucapkan terimakasih kepada :

1. Ibu Sri Huning Anwariningsih, S.T., M. Kom. selaku Rektor Universitas Sahid Surakarta yang telah memberikan izin untuk melakukan studi di Universitas Sahid Surakarta.
2. Firdhaus Hari Saputro Al Haris, S.T., M. Eng. selaku Dekan Fakultas Sains Teknologi dan Kesehatan Universitas Sahid Surakarta yang telah memberikan kesempatan untuk melakukan penelitian.
3. apt. Ahwan, S.Farm., M.Sc selaku dosen pembimbing pertama skripsi.
4. Fadilah Qonitah S.Pd., M.Sc selaku dosen pembimbing kedua skripsi.
5. Bapak dan Ibu dosen serta seluruh karyawan yang ada Universitas Sahid Surakarta.
6. Ibu Dian Kuncaraning Ratih serta para adik yang telah memberikan kasih sayang, doa, dukungan moral maupun materil, motivasi serta nasehatnya yang membuat semangat dalam menyelesaikan skripsi ini.
7. Keluarga, sahabat, serta teman-teman yang telah memberikan motivasi dan semangat sehingga penulis mampu menyelesaikan skripsi ini.
8. Teman-teman Farmasi angkatan 2019 Universitas Sahid Surakarta yang selalu mendukung dan memberikan bantuan.
9. Seluruh mahasiswa Universitas Sahid Surakarta khususnya Program Studi Farmasi terimakasih atas kebersamaannya selama ini.



Penulis menyadari bahwa masih terdapat banyak kekurangan dalam penulisan skripsi ini. Oleh karena itu, penulis mengharapkan kritik dan saran yang membangun dari berbagai pihak. Semoga skripsi ini dapat bermanfaat bagi kita semua.

Surakarta, Juli 2023

penulis

## DAFTAR ISI

Halaman

HALAMAN JUDUL .....	i
LEMBAR PERSETUJUAN .....	ii
LEMBAR PENGESAHAN .....	iii
LEMBAR PERNYATAAN ORISINALITAS KARYA .....	iv
LEMBAR PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI .....	v
MOTTO .....	vi
HALAMAN PERSEMBAHAN .....	vii
KATA PENGANTAR .....	viii
DAFTAR ISI .....	x
DAFTAR TABEL .....	xii
DAFTAR GAMBAR .....	xiii
DAFTAR LAMPIRAN .....	xiv
INTISARI .....	xv
ABSTRACT .....	xvi
BAB I PENDAHULUAN	
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	6
1.3 Tujuan Penelitian .....	7
1.4 Manfaat Penelitian .....	7
1.4.1 Bagi Peneliti .....	7
1.4.2 Bagi Universitas Usahid Surakarta .....	7
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	
2.1 Covid-19 .....	8
2.2 Virologi Covid-19 .....	9
2.3 Patogenesis Covid-19 .....	11
2.4 Etiologi Covid-19 .....	14
2.5 Epidemiologi Covid-19 .....	16
2.6 Manifestasi Klinis Covid-19 .....	17
2.7 Senyawa Kurkuminoid .....	19
2.7.1 Kurkumin .....	19
2.7.2 Bisdemethoxycurcumin .....	22
2.7.3 Demethoxycurcumin .....	25
2.8 Molecular Docking .....	26
2.8.1 Studi <i>In Silico</i> .....	28
2.9 Sumber Informasi Database .....	32
2.9.1 PubChem .....	32
2.9.2 Protein Data Bank (PDB) .....	32
2.10 Perangkat Lunak .....	33
2.10.1 Autodock Tools .....	33
2.10.2 Autodock Vina .....	34
2.10.3 Biovia Discovery Studio Visualizer .....	34

2.10.4 <i>Lipinski Rule of Five</i> .....	35
2.11 Landasan Teori.....	35
2.12 Kerangka Konsep.....	37
2.13 Hipotesis .....	38
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	
3.1 Rancangan Penelitian.....	39
3.2 Instrumen Penelitian .....	39
3.3 Variabel Penelitian.....	40
3.4 Definisi Operasional .....	41
3.5 Rencana Jalannya Penelitian.....	44
3.5.1 Tahap Persiapan .....	44
3.5.2 Tahap Pelaksanaan .....	44
3.5.3 Pengolahan Data.....	45
3.5.4 Penyusunan Laporan .....	47
3.6 Analisa Data.....	47
3.6.1 Teknik Pengumpulan.....	47
3.6.2 Teknik Analisis Data.....	47
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	
4.1 Hasil Penelitian.....	49
4.1.1 Preparasi Protein Target.....	49
4.1.2 Preparasi Ligan .....	50
4.1.3 Hasil Uji <i>Lipinski Rule of Five</i> .....	51
4.1.4 Penambatan Senyawa Kurkuminoid pada <i>Main Protease 6LU7</i> .....	52
4.1.5 Validasi Metode <i>docking</i> .....	55
4.1.6 Visualisasi Struktur.....	55
4.2 Pembahasan.....	59
4.2.1 Preparasi Proses Target.....	60
4.2.2 Preparasi Ligan .....	61
4.2.3 Hasil Uji <i>Lipinski Rule of Five</i> .....	62
4.2.4 Pembahasan Senyawa Kurkuminoid pada <i>Main Protease 6LU7</i> .....	64
4.2.5 Validasi metode <i>docking</i> .....	67
4.2.6 Visualisasi Struktur.....	70
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN</b>	
5.1 Kesimpulan .....	77
5.2 Saran.....	77
DAFTAR PUSTAKA .....	78
LAMPIRAN .....	82

## DAFTAR TABEL

	Halaman
Tabel 4.1 Hasil Uji <i>Lipinski Rule of Five</i> .....	52
Tabel 4.2 Nilai <i>Binding Affinity</i> Interaksi Protein – Ligan .....	53
Tabel 4.3 Hasil Uji Penambatan Senyawa Favipiravir .....	53
Tabel 4.4 Hasil Uji Penambatan Senyawa Bisdemetoksikurkumin.....	54
Tabel 4.5 Hasil Uji Penambatan Senyawa Kurkumin.....	54
Tabel 4.6 Hasil Uji Penambatan senyawa Demetoksikurkumin .....	54
Tabel 4.7 Hasil Validasi Ligan Terbaik Bisdemetoksikurkumin Terhadap reseptor <i>6LU7</i> .....	55

## DAFTAR GAMBAR

	Halaman
Gambar 2.1 Kurkumin .....	22
Gambar 2.2 <i>Bisdemethoxycurcumin</i> .....	25
Gambar 2.3 <i>Demethoxycurcumin</i> .....	26
Gambar 2.4 Kerangka Konsep .....	37
Gambar 4.1 Hasil Pengunduhan Bentuk Kristal <i>6LU7</i> .....	50
Gambar 4.2 Favirpiravir (a)2D(b)3D.....	50
Gambar 4.3 Kurkumin Bisdemetoksikurkumin DemetoksiKurkumin .....	51
Gambar 4.4 <i>Gridbox</i> Penambatan senyawa kurkuminoid pada Reseptor <i>6LU7</i> .....	53
Gambar 4.5 Visualisasi 2D <i>Bisdemethoxycurcumin</i> .....	56
Gambar 4.6 Visualisasi 2D Kurkumin .....	57
Gambar 4.7 Visualisasi 2D <i>Demethoxycurcumin</i> .....	58
Gambar 4.8 Visualisasi 2D Favirpiravir.....	59

## DAFTAR LAMPIRAN

	Halaman
Lampiran 1. Surat Izin Penelitian.....	82
Lampiran 2. Hasil Data Penambatan Senyawa Kurkumin dan Turunannya Terhadap Reseptor 6LU7 .....	83
Lampiran 3. Hasil Kekuatan Residu Asam Amino .....	84
Lampiran 4. Hasil Lipinski Rule of Five .....	87