



***MOLECULAR DOCKING SENYAWA FLAVONOID
DAUN KATUK (*Sauropus androgynus*) TERHADAP
NON STRUCTURAL PROTEIN 1 SARS-COV-2***

Skripsi
Diajukan guna memenuhi
sebagian syarat untuk memperoleh derajat Sarjana Kedokteran
Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan
Universitas Lambung Mangkurat

Oleh
Siti Feritasia Amellia
2010911120023

**PROGRAM STUDI KEDOKTERAN PROGRAM SARJANA
FAKULTAS KEDOKTERAN DAN ILMU KESEHATAN
UNIVERSITAS LAMBUNG MANGKURAT
BANJARMASIN**

Desember 2023

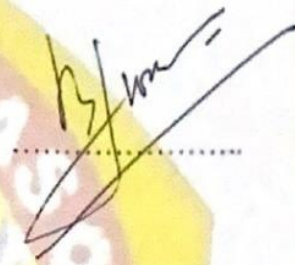
PENGESAHAN SKRIPSI

**MOLECULAR DOCKING SENYAWA FLAVONOID DAUN KATUK
(*Sauropus androgynus*) TERHADAP NON STRUCTURAL PROTEIN 1
SARS-COV-2**

Siti Feritasia Amellia, NIM: 2010911120023

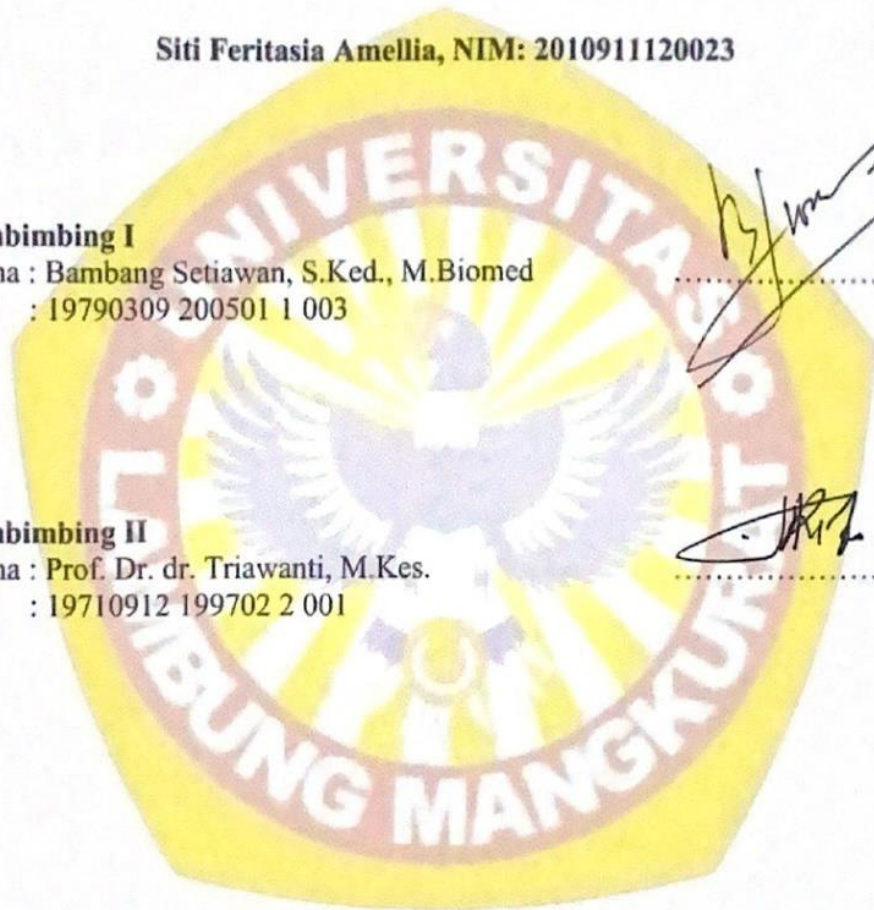
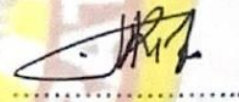
Pembimbing I

Nama : Bambang Setiawan, S.Ked., M.Biomed
NIP : 19790309 200501 1 003



Pembimbing II

Nama : Prof. Dr. dr. Triawanti, M.Kes.
NIP : 19710912 199702 2 001



Banjarmasin, 29 Desember 2023

Mengetahui,
Koordinator Program Studi Kedokteran Program Sarjana



Prof. Dr. dr. Triawanti, M.Kes.
NIP. 19710912 199702 2 001

PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa dalam skripsi ini tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu perguruan tinggi dan sepanjang pengetahuan saya juga tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Banjarmasin, 29 Desember 2023



Siti Feritasia Amellia

ABSTRAK

MOLECULAR DOCKING SENYAWA FLAVONOID DAUN KATUK (*Sauropus androgynus*) TERHADAP NON STRUCTURAL PROTEIN 1 SARS-COV-2

Siti Feritasia Amellia

COVID-19 merupakan penyakit menular yang menjadi masalah besar di seluruh dunia. Obat antiviral COVID-19 memiliki berbagai kontraindikasi pada berbagai kalangan sehingga alternatif terapi SARS-CoV-2 terus mengalami perkembangan. Tanaman Katuk (*Sauropus androgynus*) memiliki kandungan senyawa aktif flavonoid yang bersifat antioksidan yang dapat menangkal radikal bebas dalam tubuh. Tujuan dari penelitian ini untuk mengetahui senyawa aktif flavonoid daun katuk (*Sauropus androgynus*) dan mempelajari mekanisme interaksi (*molecular docking*) senyawa flavonoid tersebut terhadap protein NSP1 SARS-CoV-2 serta membandingkannya dengan obat antiviral dan antiseptik. Analisis dilakukan secara *in silico* menggunakan *software* HEX 8.0.0 Cuda untuk mendapatkan energi total dan *software* AutoDock Vina untuk mendapatkan nilai *binding energy*. Setelah itu dilakukan analisis interaksi antara ligan dengan reseptor menggunakan *software* Discovery Studio 4.1. Hasil analisis *in silico* senyawa aktif flavonoid dalam daun katuk (*Sauropus androgynus*) yaitu afzelin, kaempferol, dan trifolin dapat berinteraksi dengan protein NSP1 dan afzelin paling berpotensi dalam menghambat NSP1 SARS-CoV-2 dibandingkan obat antiviral COVID-19 dan antiseptik. Dengan demikian, daun katuk memiliki potensi sebagai alternatif obat dan antiseptik untuk menangani COVID-19.

Kata-kata kunci: COVID-19, flavonoid, daun katuk, *Sauropus androgynus*, NSP1, SARS-CoV-2

ABSTRACT

MOLECULAR DOCKING OF FLAVONOID COMPOUNDS OF KATUK LEAVES (*Sauropus androgynus*) AGAINST NON STRUCTURAL PROTEIN 1 SARS-COV-2

Siti Feritasia Amellia

*COVID-19 is an infectious disease which become a major problem worldwide. Antiviral drugs for COVID-19 had various contraindications in various groups with the result that alternative therapies for SARS-CoV-2 continue to be developed. Flavonoid in Katuk (*Sauropus androgynus*) are antioxidants that reduced free radicals. The objective of this research is to determine the active flavonoid compounds of katuk leaves (*Sauropus androgynus*) and study the interaction mechanism (molecular docking) of these flavonoid compounds on the SARS-CoV-2 NSP1 protein and compare them with antiviral drugs and antiseptics. This analysis in silico used HEX 8.0.0 Cuda software to get total energy and AutoDock Vina software to get binding energy values. Interaction between the ligand and the receptor was analyzed by Discovery Studio 4.1 software. The analysis in silico results are flavonoid compounds (afzelin, kaempferol, and trifolin) had interaction with the NSP1 protein and afzelin had the most potential of inhibiting NSP1 SARS-CoV-2 compared to antiviral drugs and antiseptic. Katuk have the potential as an alternative medicine and antiseptic for COVID-19.*

Keywords: COVID-19, flavonoid, *Sauropus androgynus*, NSP1, SARS-CoV-2

KATA PENGANTAR

Puji syukur ke hadirat Allah SWT yang telah memberikan rahmat-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “***MOLECULAR DOCKING SENYAWA FLAVONOID DAUN KATUK (Sauropus androgynus) TERHADAP NON STRUCTURAL PROTEIN 1 SARS-COV-2***”, tepat pada waktunya.

Skripsi ini disusun untuk memenuhi sebagian syarat guna memperoleh derajat Sarjana Kedokteran di Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan Universitas Lambung Mangkurat Banjarmasin. Dalam kesempatan ini penulis mengucapkan terimakasih kepada:

1. Dekan Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan, Dr. dr. Istiana, M.Kes yang memberikan kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.
2. Koordinator Program Studi Kedokteran Program Sarjana, Prof. Dr. dr. Triawanti, M.Kes. yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.
3. Kedua dosen pembimbing, Bambang Setiawan, S.Ked., M.Biomed dan Prof. Dr. dr. Triawanti, M.Kes. yang berkenan memberikan saran dan arahan dalam penyelesaian skripsi ini.
4. Orang tua tercinta H. Ahmad Gama Feriko, S.T., M.T. dan Hj. Misbah, S.H. serta kakak-kakak dan adik penulis yang telah memberikan dukungan moral, doa, dan semangat.

5. Rekan penelitian, Annisa Camellia Makati, Aghnia Nabila Ananda dan Jasmine Aisyah Putri yang menjadi teman dalam suka dan duka pada mulai dari penelitian PKM hingga penyusunan skripsi ini.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih jauh dari kesempurnaan, akan tetapi penulis berharap penelitian ini bermanfaat bagi dunia ilmu pengetahuan.

Banjarmasin, Desember 2023

Penulis

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	iii
ABSTRAK	iv
ABSTRACT	v
KATA PENGANTAR	vi
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR LAMPIRAN	xiii
DAFTAR ISTILAH	xiv
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang Masalah	1
B. Rumusan Masalah	3
C. Tujuan Penelitian	3
D. Manfaat Penelitian	4
E. Keaslian Penelitian	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	7
A. COVID-19	7
B. Katuk (<i>Sauropus androgynus</i>)	13

C. Flavonoid.....	14
D. <i>Molecular Docking</i>	16
BAB III LANDASAN TEORI DAN HIPOTESIS	22
A. Landasan Teori	22
B. Hipotesis.....	25
BAB IV METODE PENELITIAN	26
A. Rancangan Penelitian	26
B. Data Penelitian.....	26
C. Alat Penelitian	28
D. Variabel Penelitian	28
E. Definisi Operasional.....	29
F. Prosedur Penelitian.....	30
G. Teknik Pengumpulan dan Pengolahan Data.....	34
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN	36
BAB VI PENUTUP	53
A. Simpulan.....	53
B. Saran.....	54
DAFTAR PUSTAKA	55
LAMPIRAN.....	59