ANALISIS MOLEKULER *DOCKING* SENYAWA MANGOSTIN TERHADAP *SARS COV-2 SPIKE GLYCOPROTEIN* DARI KULIT MANGGIS LOKAL SEBAGAI POTENSIAL OBAT COVID 19

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh :

LISA ATRI YENI

NIM : 1810412061

Pembimbing I : Dr. Armaini, MS

Pembimbing II : Prof. Dr. Sumaryati Syukur, M.Sc

PROGRAM SARJANA

JURUSAN KIMIA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2022

ANALISIS MOLEKULER *DOCKING* SENYAWA MANGOSTIN TERHADAP *SARS COV-2 SPIKE GLYCOPROTEIN* DARI KULIT MANGGIS LOKAL SEBAGAI POTENSIAL OBAT COVID 19

Oleh :

LISA ATRI YENI

NIM : 1810412061

Skripsi ini diajukan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains pada Program Sarjana Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengatahuan Alam

Universitas Andalas

PROGRAM SARJANA

JURUSAN KIMIA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2022

INTISARI

ANALISIS MOLEKULER *DOCKING* SENYAWA MANGOSTIN TERHADAP *SARS COV-2 SPIKE GLYCOPROTEIN* DARI KULIT MANGGIS LOKAL SEBAGAI POTENSIAL OBAT COVID 19

Oleh:

Lisa Atri Yeni (NIM: 1810412061)

Dr Armaini, MS; Prof. Dr Sumaryati Syukur, M.Sc

Pembimbing

C*oronavirus Disease* 2019 (COVID-19) merupakan suatu penyakit yang dilaporkan muncul pertama kali di daerah Wuhan, China pada sekitar akhir tahun 2019 dan saat ini telah menyebar ke hampir seluruh negara di dunia. Protein S *(spike glycoprotein)* merupakan salah satu protein antigen utama virus, protein S ini berperan dalam penempelan dan masuknya virus ke dalam sel *host* (interaksi protein S dengan reseptornya di sel inang). Senyawa mangostin yang terdapat di dalam kulit manggis (*Garcinia mangostana L*) memiliki afinitas tinggi sehingga dapat menghambat protein S dari *SARS-CoV2 (severe acute respiratory syndrom coronavirus 2)* dan kulit manggis juga memiliki kandungan antioksidan kuat yang dapat meningkatkan imunitas tubuh sehingga dijadikan sebagai pencegahan Covid 19. Metode yang digunakan pada penelitian ini yaitu ekstraksi dan rekristalisasi kulit manggis muda dan tua yang dikarakterisasi dengan FTIR *(fourier transform infra red)* dan HPLC *(high perfomance liquid chromatography)*, pengukuran aktivitas antioksidan menggunakan metode DPPH (2,2-difenil-1-pikrilhidrazil, dan penggunaan metode molekuler *docking*. Isolat kulit buah manggis muda dan tua memiliki kandungan alfa mangostin yang dilihat dari hasil KLT (kromatografi lapisan tipis), eludasi struktur FTIR, dan HPLC. Isolat kulit buah manggis muda dan tua memiliki aktivitas antioksidan yang sangat kuat dengan nilai IC_{50} *(inhibition concentration)* kulit buah manggis muda 33,05 mg/L dan IC_{50} kulit buah manggis tua 40,08 mg/L. Pada molekuler *docking* Interaksi terbaik protein S Covid 19 dengan ligan yaitu alfa mangostin yang menunjukkan nilai energi ikatan -5,25 kkal/mol dengan konstanta inhibisi 142,84 µM, disamping itu alfa mangostin juga memiliki profil farmakokinetik dan toksisitas yang baik dan alfa mangostin memenuhi syarat aturan lima lipinski, sehingga alfa mangostin dapat dijadikan salah satu kandidat potensial obat covid 19.

Kata kunci: *mangostin, molecular docking, covid 19, spike glycoprotein*

ABSTRACT

MOLECULAR DOCKING ANALYSIS OF MANGOSTIN COMPOUNDS AGAINST SARS COV-2 SPIKE GLYCOPEREIN FROM THE SKIN OF LOCAL MANGOSTEEN AS A POTENTIAL COVID-19 DRUG

By:

Lisa Atri Yeni (NIM: 1810412061)

Dr Armaini, MS dan Prof. Dr Sumaryati Syukur, M.Sc

Supervisor

Coronavirus Disease 2019 (COVID-19) is a disease, this disease was reported to have first appeared in the Wuhan area, China at around the end of 2019 and has now spread to almost all countries in the world. Protein S (spike glycoprotein) is one of the main antigenic proteins of the virus, this S protein plays a role in the attachment and entry of the virus into host cells (interaction of protein S with its receptors on the host cell). Mangostin compounds contained in mangosteen (Garcinia mangostana L) have an affinity for and high antioxidants so that it can inhibit the S protein of (severe acute respiratory syndrom coronavirus 2) SARS-CoV2. The methods used in this study were the extraction and recrystallization of young and old mangosteen peels characterized by (fourier transform infra red) FTIR and HPLC *(high perfomance liquid chromatography),* measurement of antioxidant activity using the DPPH method, and molecular docking. Young and old mangosteen rind isolates contained alpha mangostin which was seen from the results of the HPLC and FTIR structure elucidation showing the structure of the alpha mangostin compound. Isolates of young and old mangosteen rind have very strong antioxidant activity with (inhibition concentration) IC_{50} values for young mangosteen 34mg/L and IC_{50} for old mangosteen 41mg/L. In molecular docking, the best interaction between protein S covid 19 and ligand, namely alpha mangostin, showed a binding energy -5,25 Kcal/mol free energy value with an inhibition constant of 142,84 uM, faalpha mangostin also meets the requirements of the five-lipinski rule, so that alpha mangostin can be used as a potential candidate for a covid 19 drug.

Keyword: *mangostin, molecular docking, covid 19, spike glycoprotein*