

**POTENSI TAMANU (*Calophyllum inophyllum*) SEBAGAI
INHIBITOR SARS-CoV-2 MENGGUNAKAN MOLECULAR
DOCKING DAN SIMULASI MOLECULAR DYNAMIC**

TESIS



**SUCI RAMDA RENA
2220442002**

Dosen Pembimbing:

Dr. Afdhal Muttaqin, M.Si

Dr. Dian Fitriyani, M.Si

**DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG**

2025

**POTENSI TAMANU (*Canophyllum inophyllum*) SEBAGAI INHIBITOR
SARS-CoV-2 MENGGUNAKAN MOLECULAR DOCKING DAN
SIMULASI MOLECULAR DYNAMIC**

ABSTRAK

Covid-19, yang disebabkan oleh virus SARS-CoV-2, telah menjadi ancaman global sejak akhir 2019 yang lalu. Salah satu target utama dalam *drug design* pengembangan antivirus terhadap SARS-CoV-2 adalah *main protease* (Mpro), yaitu protein yang berperan penting dalam proses replikasi virus. penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi potensi senyawa-senyawa triterpenoid dari tamanu (*Canophyllum inophyllum*) sebagai inhibitor SARS-CoV-2 dengan pendekatan *in-silico*, menggunakan metode simulasi *molecular docking* dan *molecular dynamics*. Dipilih sebanyak sepuluh senyawa triterpenoid, dan didocking-kan terhadap Mpro SARS-CoV-2 dengan kode PDB ID: 6W63 menggunakan *Autodock-GPU* pada *google colab*. Dari hasil *molecular docking*, senyawa *oleanolic acid* menghasilkan nilai *binding affinity* paling rendah, yaitu -8,2 kcal/mol, yang mengindikasikan afinitas ikatan yang kuat dengan *active site* protein target. Selanjutnya, kompleks *oleanolic acid*-6W63 dianalisis lebih lanjut menggunakan metode simulasi dinamika molekuler selama 10 ns menggunakan OpenMM pada *google colab*. Hasil simulasi menunjukkan bahwa kompleks tersebut memiliki stabilitas struktural yang baik, yang ditunjukkan dengan nilai *Root Mean Square Deviation* (RMSD), *Root Mean Square Fluctuation* (RMSF), dan *radius of gyration* (Rg) yang relatif stabil sepanjang simulasi. Temuan ini menunjukkan bahwa *oleanolic acid* memiliki potensi sebagai kandidat anti SARS-CoV-2 yang menjanjikan. Penelitian ini memberikan kontribusi awal untuk pengembangan terapi Covid-19 secara lebih lanjut menggunakan bahan alam melalui pendekatan komputasi.

Kata kunci: SARS-CoV-2; *main protease*; *Canophyllum inophyllum*; *molecular docking*; *molecular dynamic*

**POTENSI TAMANU (*Canophyllum inophyllum*) SEBAGAI INHIBITOR
SARS-CoV-2 MENGGUNAKAN MOLECULAR DOCKING DAN
SIMULASI MOLECULAR DYNAMIC**

ABSTRACT

Covid-19, caused by the SARS-CoV-2 virus, has been a global threat since the end of 2019. One of the main targets in drug design for developing antivirals against SARS-CoV-2 is the main protease (Mpro), a protein that plays a crucial role in the virus replication process. This research aims to identify the potential of triterpenoid compounds from tamanu (*Canophyllum inophyllum*) as SARS-CoV-2 inhibitors using an in-silico approach, employing molecular docking and molecular dynamics simulation methods. A total of ten triterpenoid compounds were selected and docked against the SARS-CoV-2 Mpro with the PDB ID code: 6W63 using Autodock-GPU on Google Colab. The results of the molecular docking indicated that oleanolic acid yielded the lowest binding affinity value of -8,2 kcal/mol, which suggests a strong binding affinity with the active site of the target protein. Furthermore, the oleanolic acid-6W63 complex was further analyzed using the molecular dynamics simulation method for 10 ns using OpenMM on Google Colab. The simulation results showed that the complex had good structural stability, as indicated by the relatively stable Root Mean Square Deviation (RMSD), Root Mean Square Fluctuation (RMSF), and radius of gyration (Rg) values throughout the simulation. These findings indicate that oleanolic acid has the potential as a promising anti-SARS-CoV-2 candidate. This study provides an initial contribution to the further development of Covid-19 therapy using natural materials through a computational approach.

Keywords: SARS-CoV-2; main protease; *Canophyllum inophyllum*; molecular docking; molecular dynamic