

**REVIEW ARTIKEL: POTENSI SENYAWA AKTIF PADA  
TANAMAN OBAT UNTUK PENANGANAN COVID-19  
DENGAN METODE MOLECULAR DOCKING**

**REVIEW ARTICLES: POTENTIAL ACTIVE COMPOUND OF  
MEDICINAL PLANTS AGAINST COVID-19 WITH  
MOLECULAR DOCKING METHOD**

**Ine Suharyani<sup>1\*</sup>, Yuniarti Falya<sup>1</sup>, Atiqoh Nurul Hakim<sup>1</sup>, Defina Al Fajira<sup>1</sup>, Nur  
Annisa Amaliaputri Sadira<sup>1</sup>, Sri Yuli Astuti<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Sekolah Tinggi Farmasi Muhammadiyah Cirebon, Jalan Cideng Indah No.3,  
Kertawinangun, Kedawung, Cirebon, Jawa Barat 45153*

*Email : [inesuharyani25@gmail.com](mailto:inesuharyani25@gmail.com)*

*Submitted : 14 January 2022 Reviewed : 15 February 2022 Accepted : 6 March 2022*

**ABSTRAK**

Covid-19 merupakan wabah yang kini tengah menjadi keresahan di masyarakat. Penyakit Covid-19 disebabkan oleh virus SARS-COV-2 atau virus *Corona*. Virus *Corona* ini pertama kali muncul di Wuhan, Provinsi Hubei, China pada Desember 2019 dengan gejala ringan seperti flu atau infeksi pernapasan berat seperti *pneumonia* dan penyebarannya sangat cepat dapat menular dari droplet yang keluar saat batuk dan bersin. Salah satu alternatif yang digunakan untuk pengobatan penyakit Covid-19 ialah dengan tanaman obat. Penambatan molekul (*Molecular Docking*) merupakan salah satu metode *in silico* (*virtual*) berbasis struktur yang paling sering digunakan dan paling sederhana. Tujuan dari review jurnal untuk mengetahui senyawa aktif pada tanaman obat yang berpotensi untuk dikembangkan sebagai pengobatan Covid-19 berdasarkan dari beberapa studi secara *in-silico*. Metode pencarian jurnal dilakukan melalui website <https://scholar.google.co.id/> dengan menggunakan kata kunci *molecular docking* Covid-19 senyawa tanaman obat, Dalam kurun waktu dari tahun 2019 sampai 2021. Hasil yang didapat adalah dari 12 senyawa aktif yang berasal dari beberapa tanaman obat, diantaranya kuersetin dari tanaman Jambu Biji Merah (*Psidium guajava L.*) dan Bawang Merah (*Allium cepa L.*) yang berpotensi menghambat pertumbuhan virus *corona* karena memiliki nilai *binding affinity* paling besar dibanding tanaman lain, yaitu -7,6 dan -7,5 yang mendekati nilai *binding affinity* dari obat pembanding yaitu Remdesivir yaitu -7,7. Senyawa kuersetin berpotensi untuk dapat dikembangkan sebagai obat untuk menangani Covid-19.

**Kata kunci** : *molecular docking*, covid-19, senyawa, tanaman obat

**ABSTRACT**

*Covid-19 is an epidemic that is currently causing unrest in the community. COVID-19 was caused by the SARS-CoV-2 virus or Corona virus. Firstly, Corona virus was found in Wuhan, Hubei Province, China in December 2019 with mild symptoms such as flu or severe respiratory infections like pneumonia. This virus was spreads faster and transmitted through the droplets when coughing and sneezing. One alternative used for the treatment of Covid-19 is medicinal plants. Molecular docking is one of the most commonly used and simplest structure-based in silico (virtual) methods. The purpose of the journal review is to find out the active compounds in medicinal plants that have the potential effect against Covid-19. The journal were carried out through the website <https://scholar.google.co.id/> using the keywords molecular docking Covid-19 medicinal plant compounds in the period from 2019*

to 2021. The results obtained were from 12 active compounds derived from some medicinal plants, quercetin is an active compound derived from the Red Guava (*Psidium guajava* L.) and Shallots (*Allium cepa* L.) plants which have the potential to inhibit the growth of the corona virus because they have binding affinity values of -7.6 and -7.5 respectively. 7.5 which is close to the binding affinity value of the comparison drug Remdesivir, which is -7.7. Quercetin has the potential to be developed as a drug to treat Covid-19.

**Keywords:** molecular docking, covid-19, compound, medicinal herb

---

#### Penulis Korespondensi :

Ine Suharyani

Sekolah Tinggi Farmasi Muhammadiyah Cirebon

Jalan Cideng Indah No.3, Kertawinangun, Kedawung, Cirebon, Jawa Barat 45153

Email : [inesuharyani25@gmail.com](mailto:inesuharyani25@gmail.com)

#### PENDAHULUAN

Saat ini, wabah Covid-19 masih menjadi keresahan di kalangan masyarakat. Penyebab dari penyakit Covid-19 ini adalah virus SARS-Cov-2 atau virus *corona*. Virus ini muncul pertama kali pada Desember tahun 2019 di Kota Wuhan, Provinsi Hubei, China. Virus ini dapat menyebabkan infeksi pernapasan ringan seperti flu dan infeksi pernapasan berat seperti *pneumonia*. Gejala yang muncul setelah terinfeksi virus ini diantaranya adalah demam, batuk, sesak napas, dan hilangnya indera perasa dan penciuman. Pada kasus berat dapat menyebabkan *pneumonia*, sindrom pernapasan akut, bahkan kematian ([Susilo et al., 2020](#)).

Pada akhir Januari 2020, WHO menetapkan status *Global Emergency* pada kasus virus Corona dan pada 11 Februari 2020 disebut sebagai COVID-19. Menurut data yang diperoleh dari *worldmeter*, kasus positif di Indonesia pada tanggal 19 Desember 2021 telah mencapai 4.260.380 kasus positif dengan jumlah kematian 143.998 jiwa dan pasien sembuh 4.111.464 jiwa. Virus *corona* sangat cepat penyebarannya, transmisi virus ini dapat terjadi melalui rute saluran pernapasan berupa *droplet* yang dapat menular saat batuk atau bersin. Namun Kemenkes menyatakan bahwa pemulihan penyakit ini dapat dilakukan tanpa perawatan khusus karena virus ini bersifat *self medication* yang artinya dapat sembuh jika sistem imun individu kuat ([Syahrir, Rahem and Prayoga, 2020](#)).

Tanaman obat adalah bahan alam atau tradisional yang sejak lama dipercaya untuk mengobati berbagai penyakit, salah satunya untuk mengobati Covid-19. Beberapa senyawa aktif yang terdapat dalam tanaman obat memiliki kemampuan sebagai terapi dalam mengobati Covid-19. Tanaman obat dipilih sebagai sumber alternatif untuk pengobatan karena dapat meminimalisasi bahaya dan efek samping dari penggunaan obat sintetik. Beberapa tanaman yang berpotensi untuk menghambat virus Covid-19 diantaranya Jambu Biji/*Psidium guajava* L. ([Gandu et al., 2021](#); [Manalu, 2021](#)), Bawang Dayak/*Eleutherine palmifolia* L. Merr ([Prasetio et al., 2021](#)), Jahe/*Zingiber officinale* ([Ratu et al., 2021](#)), bawang merah/*Allium cepa* L. ([Zahara et al., 2021](#)), dan kunyit/*Curcuma longa* Linn ([Pradani et al., 2021](#)).

Penambatan molekul (*Molecular Docking*) merupakan salah satu metode *in silico* (*virtual*) berbasis struktur yang paling sering digunakan dan paling sederhana. Penambatan molekul digunakan untuk membantu memprediksi interaksi yang terjadi antara 2 molekul yaitu senyawa aktif dan target biologis (*reseptor*). Dalam proses ini, pada umumnya dilakukan dengan memprediksi orientasi molekuler ligan dalam reseptor terlebih dahulu.. Metode berbasis struktur diperoleh dengan melihat struktur 3 dimensi target yang diinginkan pada *software* tertentu. Dari hasil tersebut, memungkinkan peringkat database molekul sesuai dengan struktur dan komplementaritas elektronik ligan ke target tertentu ([Pradani et al., 2021](#)).

## METODE PENELITIAN

Metode yang digunakan dalam penulisan review jurnal ini adalah studi pustaka. Pencarian jurnal dilakukan melalui website <https://scholar.google.co.id/> dengan kata kunci yang digunakan adalah “*molecular docking*, covid-19, senyawa, tanaman obat”. Diperoleh 172 jurnal, setelah itu dilakukan skrining dan diambil 6 jurnal dengan kriteria sebagai berikut:

1. *Full text*
2. Berbahasa Indonesia
3. Terbit dari tahun 2019 sampai 2021

## PEMBAHASAN

Tujuan dari review jurnal ini adalah untuk mengetahui potensi senyawa aktif pada beberapa tanaman obat yang berpotensi untuk dikembangkan dalam menangani Covid-19. Metode yang digunakan sebagian besar adalah dengan metode *in-silico* (virtual) yaitu dengan penambatan molekul (*molecular docking*). Pada umumnya, beberapa jurnal memiliki persamaan secara garis besar seperti penggunaan *software* untuk melakukan docking, proses penambatan molekul (*molecular docking*), serta reseptor yang digunakan.

Penambatan molekul (*molecular docking*) adalah studi tentang bagaimana dua atau lebih struktur molekul dapat berikatan, dengan dilengkapi dengan visualisasi secara 3 dimensi. Penambatan molekul adalah alat yang digunakan dalam biologi molekuler struktural dan penemuan obat berbasis struktur. Tujuan dari penambatan ligan-protein (*molecular docking*) ini adalah untuk memahami dan memprediksi pengenalan molekuler, menemukan kemungkinan mode ikatan dan memprediksi afinitas pengikatan (Morris, Huey and Olson, 2008).

Proses *molecular docking* atau penambatan molekul sebagian besar menggunakan aplikasi AutoDock Tools dan AutoDock Vina. Proses *molecular docking* dengan menggunakan AutoDock Tools adalah yang pertama mempersiapkan reseptor dengan menggabungkan antara reseptor dengan hidrogen, dan yang kedua adalah mempersiapkan ligan yang akan digunakan. Keduanya disimpan menggunakan format PDBQT. Setelah itu dilakukan penambatan molekul ligan dengan reseptor. Sedangkan pada AutoDock Vina yang terdiri dari 3 poin yaitu Vina, Vina Split dan Vina License. Kemudian dibantu dengan aplikasi command prompt/terminal untuk perhitungan *binding affinity* dari ligan. Selanjutnya Vina Split digunakan untuk memisahkan satu per satu hasil dari ligan. Setelah itu dilakukan visualisasi dengan menggunakan *Discovery Studio Visualisasi* untuk melihat sisi aktif atau tempat penambatan area reseptor tersebut dalam bentuk 2 dimensi maupun 3 dimensi (Prasetyo *et al.*, 2021).

Struktur senyawa aktif pada tanaman obat yang akan dianalisis dalam bentuk ligan diperoleh melalui website PubChem dengan format 3 dimensi SDF yang kemudian diubah menjadi PDB. Perolehan struktur reseptor SARS-CoV-2 melalui PDB (*Protein Data Bank*) dimana sebagian besar digunakan reseptor 6LU7 tersebut akan dibersihkan dari residu menggunakan aplikasi *Discovery Studio*. Hasil studi secara *in-silico* dari beberapa tanaman obat yang memiliki aktivitas penghambatan terhadap Covid-19 dapat dirangkum pada [Tabel I](#).

Tabel I. *Molecular Docking* Beberapa Senyawa Aktif Pada Tanaman Obat

Tanaman	Senyawa Aktif	Software yang digunakan	Reseptor	Referensi
<b>Jambu Biji Merah</b> ( <i>Psidium guajava L.</i> )	Asam Askorbat dan Kuersentin	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>AutoDock, AutoDock Vina, Open babel, Biovia Discovery Studio 2020</i></li> <li>• Proses <i>molecular docking</i> menggunakan aplikasi <i>AutoDock tools</i> dan <i>AutoDock Vina</i></li> </ul>	Protease utama dari SARS-CoV-2 dengan kode PDB 6LU7	(Gandu <i>et al.</i> , 2021)
<b>Bawang Dayak</b> ( <i>Eleutherine palmifolia (L.) Merr</i> )	Isoeleutherin dan Isoeleutherol	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>AutoDock Tools/MGL Tools, AutoDock Vina, Open Babel, dan Biovia Discovery Studio 2020</i></li> <li>• Proses <i>molekuler docking</i> menggunakan aplikasi <i>AutoDock Tools</i> dan <i>AutoDock Vina</i>.</li> </ul>	Protease utama dari SARS-CoV-2 dengan kode PDB 6LU7	(Prasetio <i>et al.</i> , 2021)
<b>Jahe</b> ( <i>Zingiber officinale</i> )	Gingerol dan Zingiberol	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>AutoDock Tools, AutoDock Vina, Biovia Discovery Studio 2020, dan Open Babel GUI.</i></li> </ul>	Protease utama dari SARS-CoV-2 dengan kode PDB 6LU7	(Ratu <i>et al.</i> , 2021)
<b>Bawang Merah</b> ( <i>Allium cepa L.</i> )	Kuersetin	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>AutoDock, Vina Wizard, PyRx, PyMol, serta Discovery Visualizer 2021</i></li> <li>• Proses <i>docking</i> dilakukan menggunakan aplikasi <i>PyRx</i> yang terintegrasi dengan <i>Vina Wizard</i></li> </ul>	Protein S dengan kode PDB-ID: 6VSB	(Zahara <i>et al.</i> , 2021)
<b>Kunyit</b> ( <i>Curcuma Longa Linn.</i> )	Kurkumin dan Arturmeron	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>AutoDock 4.2, BIOVIA Discovery Studio Visualizer, Open Babel 2.0, dan AutoDock Vina</i></li> <li>• Proses <i>molecular docking</i> menggunakan aplikasi <i>AutoDock Tools</i> dan <i>AutoDock Vina</i></li> </ul>	Protease utama dari SARS-CoV-2 dengan kode PDB 6LU7	(Pradani <i>et al.</i> , 2021)
<b>Jambu Biji</b> ( <i>Psidium guajava L.</i> )	Kaempferol, Kuersetin dan Hyperin,	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <i>MarvinSketch, Yasara, Plants, Pubchem</i> (database senyawa), PDB (<i>Protein Data Bank</i>), dan PLIP yang digunakan untuk visualisasi.</li> <li>• Penambatan molekul dengan <i>PLANTS</i>.</li> </ul>	Protease utama dari SARS-CoV-2 dengan kode PDB 6LU7	(Manalu, 2021)

Virus SARS-CoV-2 memiliki protein utama yaitu *Spike Envelope (S)*/Protein S yang dapat berinteraksi dengan reseptor *Angiotensin Converting Enzyme 2 (ACE2)* pada sel inang (Zheng *et al.*, 2020). Interaksi yang terjadi antara ACE2 dan reseptor SARS-CoV-2 akan dihambat oleh ARB (*Angiotensin Receptor Blockers*) atau penghambat reseptor Angiotensin (Ikawaty, 2020). Peran ACE2 sebagai reseptor SARS-CoV-2 membuat banyak peneliti mengembangkan cara untuk menemukan penghambatan interaksi SARS-CoV-2 dengan protein S ACE2 (Yan *et al.*, 2020). Salah satunya adalah dengan mengeksplorasi senyawa aktif pada tanaman obat yang dapat digunakan untuk menghambat interaksi Protein S dari virus SARS-CoV-2 terhadap ACE2.

*Binding affinity* merupakan indikator untuk menggambarkan potensi aktivitas penghambatan senyawa terhadap aktivitas virus Covid-19. *Binding affinity* senyawa aktif dalam setiap tanaman dibandingkan dengan pembanding Remdesivir. Berdasarkan hasil

penambahan molekul senyawa yang terdapat dalam beberapa tanaman herbal diperoleh *binding affinity* seperti pada [Tabel II](#)

**Tabel II.** Hasil *Binding Affinity* Senyawa Aktif Pada Tanaman Obat

Senyawa Aktif	<i>Binding Affinity</i>	Referensi
Asam Askorbat	-5,4	(Gandu <i>et al.</i> , 2021)
Kuersetin	-7,6	
Pembanding (Remdesivir)	-7,3	
Isoeutherin	-6,9	(Prasetio <i>et al.</i> , 2021)
Isoeutherol	-6,9	
Pembanding (Remdesivir)	-7,3	
Gingerol	-5,7	(Ratu <i>et al.</i> , 2021)
Zingiberol	-5,7	
Pembanding (Remdesivir)	-7,3	
Kuersetin	-7,5	(Zahara <i>et al.</i> , 2021)
Kurkumin	-7,0	(Pradani <i>et al.</i> , 2021)
Ar-tumerone	-5,8	
Pembanding (Remdesivir)	-7,7	

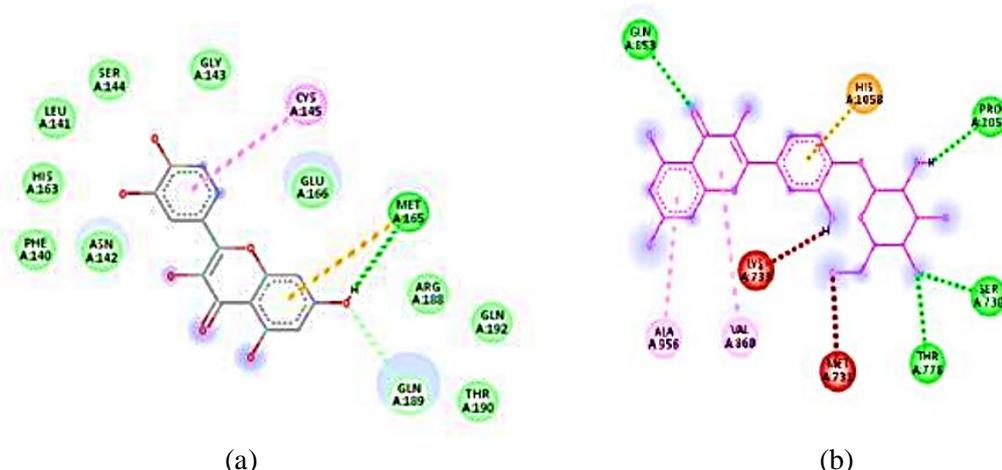
Berdasarkan Tabel II dan Tabel III dapat diketahui senyawa aktif mana saja yang memiliki potensi lebih tinggi untuk dikembangkan menjadi obat Covid-19. Perbedaan nilai *binding affinity* dan *score docking* masing-masing senyawa aktif yang nantinya akan dibandingkan dengan nilai *binding affinity/score docking* senyawa pembanding. Dalam 6 jurnal yang diambil, pembanding yang paling banyak digunakan adalah obat Remdesivir yaitu obat yang sudah dipakai untuk terapi pada pasien Covid-19 karena telah diuji secara *in vitro*.

**Tabel III.** Hasil *Score Docking* Senyawa Aktif Pada Tanaman Obat

Senyawa Aktif	<i>Score Docking</i>	Referensi
Kaemferol	-90.399	(Manalu, 2021)
Kuersetin	-92,012	
Hyperin	-92.231	
Pembanding (Ritonavir)	-128.462	
Pembanding (Remdesivir)	-111.173	

Setelah proses *molecular docking* dilakukan, didapatkan nilai *Vina Score* atau *score docking* yang menunjukkan keabsahan hasil *molecular docking*. nilai *Vina Score* menunjukkan nilai *binding affinity* antara interaksi dengan reseptor protein dan ligan yang diuji. Nilai *binding affinity* yang rendah dapat menunjukkan kestabilan interaksi yang lebih baik antara ligan dan reseptornya. Semakin rendah energi pada ikatannya, maka semakin tinggi afinitas ikatannya. Sedangkan *score docking* adalah nilai yang digunakan untuk melihat kemampuan obat untuk berikatan dengan reseptor. Semakin rendah *score docking* maka afinitas antara reseptor dengan ligannya semakin baik (Manalu, 2021).

Berdasarkan data pada Tabel I dan Tabel II tersebut, dari 12 senyawa aktif pada beberapa tanaman obat, yang berpotensi dapat dikembangkan sebagai obat Covid-19 adalah Kuersetin yang berasal dari tanaman Jambu Biji Merah/*Psidium guajava L.* (Gandu *et al.*, 2021; Manalu, 2021) dan Kuersetin yang berasal dari Bawang Merah/*Allium cepa L.* (Zahara *et al.*, 2021), dikarenakan nilai *binding affinity* senyawa aktif tersebut berturut-turut -7,6 dan -7,5, nilai tersebut mendekati nilai *binding affinity* dengan pembanding obat Remdesivir yaitu -7,7.



**Gambar 1.** Molecular Docking kuersetin dari jambu biji merah (a) dan bawang merah (b) dengan reseptor Covid-19 (Gandu et al., 2021; Zahara et al., 2021)

Hasil tersebut menunjukkan bahwa senyawa aktif kuersetin dalam Jambu Biji Merah (*Psidium guajava L.*) dan Bawang Merah (*Allium cepa L.*) berpotensi dapat menghambat pertumbuhan virus corona sehingga dapat dikembangkan menjadi obat untuk menangani Covid-19 (Gandu et al., 2021; Manalu, 2021; Zahara et al., 2021).

## KESIMPULAN

Senyawa kuersetin yang berasal dari tanaman Jambu Biji Merah (*Psidium guajava L.*) dan Bawang Merah (*Allium cepa L.*) memiliki nilai *binding affinity* yang mendekati obat Remdesivir sehingga berpotensi untuk dapat dikembangkan sebagai obat untuk menangani Covid-19.

## DAFTAR PUSTAKA

- Gandu, I. V. et al. (2021) 'Molecular Docking Senyawa Asam Askorbat dan Kuersetin pada Tumbuhan Jambu Biji Merah (*Psidium guajava L.*) Sebagai Pencegah COVID-19', *Jurnal e-Biomedik*, 9(2), pp. 170–175. doi: 10.35790/ebm.v9i2.31846.
- Ikawaty, R. (2020) 'Dinamika Interaksi Reseptor ACE2 dan SARS-CoV-2 Terhadap Manifestasi Klinis COVID-19', *KELUWIH: Jurnal Kesehatan dan Kedokteran*, 1(2), pp. 70–76. doi: 10.24123/kesdok.v1i2.2869.
- Manalu, R. T. (2021) 'Molecular docking senyawa aktif buah dan daun jambu biji (*Psidium guajava L.*) terhadap main protease pada SARS-CoV-2', *Forte Jurnal*, 1(2), pp. 9–16.
- Morris, G. M., Huey, R. and Olson, A. J. (2008) *Using AutoDock for Ligand-Receptor Docking*. doi: 10.1002/0471250953.bi0814s24.
- Pradani, T. C. et al. (2021) 'Molecular Docking Terhadap Senyawa Kurkumin dan Arturmeron pada Tumbuhan Kunyit (*Curcuma Longa Linn.*) yang Berpotensi Menghambat Virus Corona', *Jurnal e-Biomedik*, 9(2), pp. 208–214. doi: 10.35790/ebm.v9i2.31888.
- Prasetio, N. F. et al. (2021) 'Molecular Docking terhadap Senyawa Isoeuletherin dan Isoeuletherol sebagai Penghambat Pertumbuhan SARS-CoV-2', *Jurnal e-Biomedik*, 9(1), pp. 101–106. doi: 10.35790/ebm.v9i1.31809.
- Ratu, B. D. P. M. et al. (2021) 'Molecular Docking Senyawa Gingerol dan Zingiberol pada Tanaman Jahe sebagai Penanganan COVID-19', *Jurnal e-Biomedik*, 9(1), pp. 126–130. doi: 10.35790/ebm.v9i1.32361.
- Susilo, A. et al. (2020) 'Coronavirus Disease 2019: Tinjauan Literatur Terkini', *Jurnal Penyakit Dalam Indonesia*, 7(1), p. 45. doi: 10.7454/jpdi.v7i1.415.
- Syahrir, A., Rahem, A. and Prayoga, A. (2020) 'Religiositas Mahasiswa Farmasi UIN Malang Selama Pandemi COVID-19', *Journal of Halal Product and Research*, 3(1),

pp. 25–34.

Yan, R. *et al.* (2020) ‘Structural Basis For The Recognition of SARS-CoV-2 by Full-Length Human ACE2’, *Science*, 367(6485), pp. 1444–1448.

Zahara, S. *et al.* (2021) ‘Analisis Aktivitas Inhibisi Kuersetin Pada Bawang Merah ( *Allium cepa* L .) terhadap Penetrasi SARS-CoV-2 Menggunakan Metode Molecular Docking’, (November), pp. 328–335.

Zheng, Y. Y. *et al.* (2020) ‘Reply to: “Interaction between RAAS inhibitors and ACE2 in the context of COVID-19”’, *Nature Reviews Cardiology*, 17(5), pp. 313–314. doi: 10.1038/s41569-020-0369-9.

