

INTISARI

COVID-19 merupakan sindrom pernapasan akut parah yang disebabkan Coronavirus (SARS-CoV-2). Virus ini masuk ke dalam inang diterima oleh reseptor *angiotensin-converting enzyme* (ACE2). Banyak penelitian telah menunjukkan bahwa tingkat interleukin-6 (IL-6) yang lebih tinggi lebih signifikan daripada sitokin lain pada COVID-19 dan periodontitis. Metronidazol merupakan salah satu pilihan antibiotik untuk pengobatan periodontitis yang dapat menurunkan kadar beberapa sitokin. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis interaksi metronidazol terhadap reseptor virus corona IL-6 pada periodontitis melalui studi *docking* molekuler *in silico*.

Docking molekuler dilakukan menggunakan aplikasi AutoDock4.0 dengan reseptor IL-6 (7CD8) sebagai model protein untuk memprediksi pengikatan metronidazol dengan 1000 kali uji.

Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa terdapat interaksi antara metronidazol dan reseptor IL-6 melalui interaksi hidrogen pada residu asam amino arginin 91 dengan energi ikatan rata-rata -2,78. Hasil uji statistik menunjukkan bahwa metode *docking* molekuler memiliki nilai RMSD < 2 (p-value = 1). Metronidazol berinteraksi dengan coronavirus pada reseptor IL-6 periodontitis berdasarkan studi *in silico* dan berpotensi dapat digunakan sebagai pilihan terapi pada COVID-19 dengan periodontitis.

Kata kunci: metronidazol, coronavirus, IL-6, periodontitis, *docking* molekuler

ABSTRACT

Coronavirus disease 2019 (COVID-19) is caused by a severe acute respiratory syndrome called coronavirus 2 (SARS-CoV-2). This virus was entered inside the host by angiotensin-converting enzyme receptors (ACE2). Many studies have shown that higher levels of interleukin-6 (IL-6) were more significant than other cytokines in COVID-19 and periodontitis. Metronidazole is one of the antibiotic choices for the treatment of periodontitis. It could decrease the levels of several cytokines. This study aimed to analyze the interaction of metronidazole against the IL-6 coronavirus receptor in periodontitis through an in silico molecular docking study.

Molecular docking was performed using AutoDock4.0 with IL-6 receptor (7CD8) as the protein model to predict the binding of metronidazole with 1000 runs. The results of this study showed that there was an interaction between metronidazole and the IL-6 receptor via hydrogen interaction at the amino acid residue arginine 91 with a mean bond energy of -2.78. The statistical test showed that the molecular docking method had an RMSD value < 2 (p-value = 1). Metronidazole had an interaction with coronavirus at the IL-6 receptor of periodontitis based on an in silico study and potentially could be used as a therapeutic option in COVID-19 with periodontitis.

Keywords: metronidazole, coronavirus, IL-6, periodontitis, molecular docking