

**KAJIAN PENAMBATAN DAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL
SENYAWA-SENYAWA TURUNAN VITEXIN SEBAGAI INHIBITOR
TERHADAP PROTEASE UTAMA SARS-CoV-2**

LALU REZA REZKI MUANGGARA
20/466468/PPA/06034

INTISARI

Penelitian tentang kajian penambatan dan simulasi dinamika molekul senyawa-senyawa turunan Vitexin sebagai inhibitor protease utama dari SARS-CoV-2 (Mpro) telah dilakukan. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mendapatkan metode optimasi geometri terbaik untuk senyawa Vitexin, mendapatkan struktur molekul baru turunan Vitexin yang memiliki interaksi antarmolekul terbaik dengan protease utama SARS-CoV-2 melalui penambatan molekul, serta mengetahui kestabilan interaksi antara senyawa turunan Vitexin dengan protease utama SARS-CoV-2 yang memiliki hasil penambatan molekul terbaik menggunakan metode simulasi dinamika molekul.

Penelitian diawali dengan melakukan optimasi geometri terhadap senyawa Vitexin dengan beberapa variasi basis set untuk mencari metode terbaik. Selanjutnya akan dibuat senyawa baru turunan Vitexin dengan menambahkan beberapa gugus fungsi baru. Kemudian dilakukan penambatan molekul terhadap Senyawa vitexin dan turunannya dengan Mpro. Hasil penambatan molekul terbaik selanjutnya akan dianalisis kestabilan interaksinya dengan simulasi dinamika molekul.

Metode optimasi geometri yang dipilih untuk melakukan optimasi geometri senyawa Vitexin dan turunannya adalah 6-31G + (2d,p) dengan nilai *press* 2687,51 dan nilai R^2 0,9895. Senyawa turunan Vitexin dibuat dengan menambahkan gugus fungsi -CH(CH₃)₂, -CHO, -COOH, -OCH(CH₃)₂, dan -OH pada cincin aromatis nomor 1. Senyawa turunan Vitexin yang memberikan hasil interaksi terbaik dengan Mpro adalah senyawa dengan gugus fungsi -CH(CH₃)₂ (M-3) dengan energi ikat sebesar -4,41 kkal/mol. Simulasi dinamika molekul terhadap senyawa M-3 dilakukan pada temperatur 300 K dan tekanan 1 atm selama 50 ns. Senyawa M-3 dan Mpro membentuk kompleks yang stabil berdasarkan hasil grafik RMSD, RMSF, RoG, dan jumlah ikatan hidrogen.

Kata kunci: Optimasi Geometri, Penambatan Molekul, Protease Utama SARS-CoV-2, Simulasi Dinamika Molekuler, Vitexin dan Turunannya.

MOLECULAR DOCKING STUDY AND MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF VITEXIN DERIVATIVES AS MAIN PROTEASE INHIBITORS FROM SARS-CoV-2

LALU REZA REZKI MUANGGARA
20/466468/PPA/06034

ABSTRACT

Research of molecular docking study and molecular dynamic simulation of Vitexin derivatives as main protease inhibitor from SARS-CoV-2 (Mpro) has been carried out. The purpose of this study was to obtain the best geometry optimization method for Vitexin compounds, to obtain a new molecular structure of Vitexin derivatives that has the best intermolecular interaction with the main protease of SARS-CoV-2, and to determine the stability of the interaction between Vitexin-derived compounds and the main protease SARS-CoV-2 which has the best molecular docking results using the molecular dynamics simulation method.

Research begins by optimizing the geometry of Vitexin compound with several variations of basis set to find the best. Furthermore, new compounds derived from Vitexin will be made by adding several new functional groups. The best molecular docking result will then be analyzed for the complex interaction stability by molecular dynamics simulation.

The geometry optimization method chosen to optimize the geometry of the Vitexin compound and its derivatives is 6-31G + (2d,p) with a press value of 2687.51 and an R2 value of 0.9895. Vitexin derivative compounds are made by adding functional groups -CH(CH₃)₂, -CHO, -COOH, -OCH(CH₃)₂, and -OH on aromatic ring number 1. Vitexin derivative compounds that gave the best interaction results with Mpro protein were compounds with a functional group - CH(CH₃)₂ (M-3) which gave a binding energy of -4.41 kcal/mol. Molecular dynamics simulation of compound M-3 was carried out at a temperature of 300 K and a pressure of 1 atm for 50 ns. M-3 compounds and Mpro protein formed a stable complex based on the results of the graphs of RMSD, RMSF, RoG, and the number of hydrogen bonds.

Keywords: Geometry Optimization, Main Protease SARS-CoV-2, Molecular Docking, Molecular Dynamics Simulation, Vitexin and its Derivatives.