

## INTISARI

Periodontitis dapat menjadi sumber SARS-CoV-2 dan reservoir potensial untuk meningkatkan viral load di rongga mulut pasien terkonfirmasi COVID-19 yang dapat meningkatkan kadar IL-6 (Interleukin-6) yang merupakan mediator dalam proses destruksi periodontal. Asam hyaluronat (HA) biasa digunakan dalam pengobatan pada pasien COVID-19 dengan periodontitis. Studi ini mengkaji, meneliti, dan menganalisis potensi dan interaksi molekuler asam hyaluronat (HA) melalui *molecular docking* terhadap protein IL-6 menggunakan metode dengan aplikasi *Molecular Operating Environment* (MOE) 2015.10.

Pengujian diawali dengan preparasi ligan uji (asam hyaluronat) serta preparasi dan *redocking* protein IL-6 (PDB: 7DC8, 1N26, dan 1ALU). Apabila nilai RMSD  $<2\text{\AA}$ , maka dapat dilakukan *docking* menggunakan metode tervalidasi sebanyak 10 pose. *Redocking* IL-6 (PDB: 7DC8; PDB: 1ALU; dan PDB: 1N26) dengan ligan natifnya menghasilkan nilai RMSD berturut-turut = 0,9807; 0,9736; dan 1,1153 ( $<2\text{\AA}$ ) sehingga metode *Triangle Matcher – Induce Fit* dan reseptor-reseptor tersebut valid untuk digunakan dalam *molecular docking* ligan uji.

Hasil dari penelitian ini adalah terjadi interaksi antara HA dengan IL-6 pasien COVID-19 dengan periodontitis karena hasil *docking score* ligan uji asam hyaluronat yang lebih kecil daripada ligan natif IL-6. Interaksi molekuler yang terjadi yakni pada asam amino Gly 299, Leu 98, Ser 52, dan Gln 53 (PDB: 7DC8); Arg 30, Arg 182, dan Arg 179 (PDB: 1N26); serta Asp 221 (PDB: 1ALU). Asam hyaluronat berpotensi sebagai salah satu alternatif terapi periodontitis pada pasien COVID-19 dalam kajian *in silico*.

Kata kunci: *periodontitis, COVID-19, IL-6, asam hyaluronat, in silico*.

## ABSTRACT

Periodontitis can be a source of SARS-CoV-2 and a potential reservoir for increasing viral load in the oral cavity of confirmed COVID-19 patients which can increase levels of IL-6 (Interleukin-6) which is a mediator in the process of periodontal destruction. Hyaluronic acid (HA) is commonly used in the treatment of COVID-19 patients with periodontitis. This study examines, studies, and analyzes the potential and molecular interactions of hyaluronic acid (HA) through molecular docking of IL-6 protein using the Molecular Operating Environment MOE 2015.10 method.

The test begins with the ligand preparation test (hyaluronic acid) and the preparation and redocking of IL-6 protein (GDP: 7DC8, 1N26, and 1ALU). If the RMSD value is  $< 2\text{\AA}$ , then 10 poses can be docked using a validated method. Redocking IL-6 (GDP: 7DC8; PDB: 1ALU; and PDB: 1N26) with its native ligand resulted in RMSD values = 0.9807, respectively; 0.9736; and 1.1153 ( $< 2\text{\AA}$ ) so that the Triangle Matcher – Induce Fit method and these receptors are valid for use in molecular docking ligand assays.

Molecular interactions that occur between hyaluronic acid and IL-6 in COVID-19 patients with periodontitis in an in silico study, namely the amino acids Gly 299, Leu 98, Ser 52, and Gln 53 (GDP: 7DC8); Arg 30, Arg 182, and Arg 179 (GDP: 1N26); and Asp 221 (GDP: 1ALU). Hyaluronate acid has the potential as an alternative therapy for periodontitis in COVID-19 patients in an in silico study.

**Keywords:** *periodontitis, COVID-19, IL-6, hyaluronat acid, in silico.*