

PENAMBATAN MOLEKUL DAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER SENYAWA TURUNAN MYRICITRIN SEBAGAI ANTIVIRUS COVID-19

Ni Putu Novia Putri
17/412691/PA/18010

INTISARI

Penelitian mengenai penambatan molekul dan simulasi dinamika molekuler senyawa turunan myricitrin sebagai antivirus COVID-19 telah dilakukan. Tujuan dari penelitian ini adalah melakukan optimasi geometri senyawa myricitrin dan turunannya, menambatkan molekul myricitrin dan turunannya dengan M^{pro} SARS-CoV-2 untuk mendapatkan senyawa antivirus COVID-19 yang lebih baik, dan menganalisis kestabilan interaksi kompleks turunan myricitrin hasil penambatan molekul terbaik dengan M^{pro} SARS-CoV-2 menggunakan metode simulasi dinamika molekuler.

Optimasi geometri dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak Gaussian dengan metode DFT B3LYP 6-31G(d,p). Penambatan molekul dilakukan pada senyawa myricitrin dan turunannya sebagai ligan dan M^{pro} SARS-CoV-2 (PDB ID: 6W63) sebagai reseptor. Penambatan molekul dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak Autodock Tools dengan metode *Lamarckian Genetic Algorithm* dengan ukuran *grid box* 40×40×40 Å³. Simulasi dinamika molekuler dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak GROMACS. Medan gaya yang digunakan adalah GROMOS pada 300 K, 1 atm, selama 4 ns dengan *timestep* 2 fs.

Berdasarkan hasil penambatan molekul, turunan myricitrin yang memiliki hasil terbaik adalah turunan myricitrin dengan modifikasi –C₂H₅. Senyawa tersebut memberikan hasil interaksi spesifik berupa pi-sulfur dengan Cys 145 dan pi-kation dengan His 41. Hasil simulasi dinamika molekuler menunjukkan kompleks ligan modifikasi –C₂H₅ dan M^{pro} SARS-CoV-2 stabil.

Kata kunci: turunan myricitrin, penambatan molekul, simulasi dinamika molekuler.

MOLECULAR DOCKING AND MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION OF MYRICITRIN DERIVATIVE COMPOUND AS ANTI-COVID-19

Ni Putu Novia Putri
17/412691/PA/18010

ABSTRACT

Molecular docking and molecular dynamic simulation of M^{pro} SARS-CoV-2 and myricitrin derivative was done. The purposes are to optimize the geometry structure of myricitrin and its derivatives, dock the myricitrin and its derivatives with M^{pro} SARS-CoV-2 to get potential COVID-19 antivirus, and analyze the complex interaction stability of myricitrin derivative from best docking molecule with M^{pro} SARS-CoV-2 using dynamic molecular simulation.

Geometry optimization was performed using DFT B3LYP 6-31G(d,p) method in Gaussian software. Myricitrin and its derivatives, as ligand, were docked with M^{pro} SARS-CoV-2 (PDB ID: 6W63) as the receptor. Molecular docking was performed using the Lamarckian Genetic Algorithm method in Autodock Tools with 40×40×40 Å³ size of the grid box. Molecular dynamic simulation was performed with GROMOS at 300 K and 1 atm during 4 ns. The timestep that was used was 2 fs.

According to the molecular docking result, myricitrin derivative with –C₂H₅ modification has the best result. The specific interactions are pi–sulfur with Cys 145 and pi–cation with His 41. M^{pro} SARS-CoV-2 and –C₂H₅ myricitrin derivative complex were stable according to the dynamic simulation result.

Keywords: molecular docking, molecular dynamic simulation, myricitrin derivative.