

STUDI PENAMBATAN MOLEKULER SENYAWA BIOAKTIF FLAVONOID DARI BEBERAPA TANAMAN HERBAL DENGAN PAPAIN-LIKE PROTEASE SARS-COV-2 SEBAGAI KANDIDAT INHIBITOR

Shaltsa Nadya
17/414645/PA/18145

INTISARI

Severe acute respiratory syndrome-Coronavirus-2 (SARS-CoV-2) merupakan keluarga *betacoronavirus* yang mana menginfeksi manusia pada sistem pernafasan. Virus inilah yang menyebabkan adanya *pandemic* COVID-19 yang pertama kali ditemukan di Wuhan, Cina pada bulan Desember 2019. Salah satu target enzim yang digunakan dalam penelitian ini adalah *Papain-Like* protease (PLpro) SARS-CoV. Inhibisi pada enzim ini menghambat kerja pada replikasi virus dan menekan disregulasi pensinyalan dalam sel yang terinfeksi.

Senyawa inhibitor yang digunakan pada penelitian ini yaitu *Acacetin*, *Isobavachalcone*, *Puerarin*, *Geraniol*, *Ermanin*, *N-Cis Feruloyltyramine*, *Auraptene*, *Baicalin* dan *Pinostrobin*. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui daya hambat beberapa senyawa aktif dari bahan alam terhadap protein target COVID-19 secara *in silico* dengan menggunakan penambatan molekuler. Penelitian *in silico* dilakukan menggunakan program autodock 4.2 dengan mengevaluasi energi ikat antar senyawa aktif.

Hasil menunjukkan bahwa *Acacetin* memiliki nilai *binding energy* (ΔG) paling rendah yaitu sebesar -11,4 kkal/mol dan RMSD sebesar 1,55 Å. Berdasarkan interaksinya *Acacetin* memiliki kemiripan residu asam amino dari PLpro SARS-CoV dan ligan standarnya dengan TYR269 dan ASP165.

Kata kunci: penambatan molekuler, flavonoid, *papain-like* protease dan *severe acute respiratory syndrome-Coronavirus 2* (SARS-CoV-2).

STUDY OF MOLECULAR DOCKING OF FLAVONOID BIOACTIVE COMPOUNDS FROM HERBAL PLANTS WITH PAPAIN-LIKE PROTEASE SARS-COV-2 AS INHIBITOR CANDIDATES

Shaltsa Nadya
17/414645/PA/18145

ABSTRACT

Severe acute respiratory syndrome-Coronavirus-2 (SARS-CoV-2) is a family of betacoronaviruses in which infects humans in the respiratory system. This virus caused the COVID-19 pandemic which was first discovered in Wuhan, China in December 2019. One of the target enzymes was used in this study was the Papain-Like protease (PLpro) SARS-CoV. Inhibition of this enzyme inhibits viral replication and suppresses signaling dysregulation in infected cells.

The inhibitor compounds used in this study were Acacetin, Isobavachalcone, Puerarin, Geraniol, Ermanin, N-Cis Feruloyltyramine, Auraptene, Baicalin and Pinostrobin. The purpose of this research is to determine the inhibitory ability of several active compounds from natural sources against COVID-19 target protein in silico using molecular docking. In silico research was conducted using autodock 4.2 program by evaluating the binding energy between the active compound.

The results showed that Acacetin has the lowest binding energy (ΔG) value of -11.4 kcal/mol and RMSD of 1.55 Å. Based on its interactions, Acacetin has similar amino acid residues from PLpro SARS-CoV and its standard ligands with TYR269 and ASP165.

Keywords: molecular docking, flavonoids, papain-like protease and severe acute respiratory syndrome-Coronavirus 2 (SARS-CoV-2).