

Studi in silico interaksi molekuler antara propolis tetragonula aff. biroi dengan target protein penyebab covid-19 = Molecular interaction in silico study between tetragonula aff. biroi propolis and covid-19 therapeutic protein targets

Rafidha Irdiani, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20505717&lokasi=lokal>

Abstrak

Coronavirus disease 2019 (Covid-19) merupakan penyakit saluran pernapasan yang disebabkan oleh virus severe acute respiratory syndrome 2 (SARS-CoV-2). Saat ini, Covid-19 menjadi masalah kesehatan global dan ditetapkan sebagai pandemic pada Maret 2020. Kompleksitas dan mutasi ssRNA virus yang sangat cepat menyebabkan dibutuhkan waktu lama untuk menghasilkan vaksin yang efektif. Sementara itu, angka kematian yang terus meningkat mengiringi peningkatan angka kasus setiap harinya membuat tingginya urgensi penemuan obat. Terdapat dua target pengobatan Covid-19 yang menjanjikan, yaitu protease SARS-CoV-2 dan ACE-2. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi propolis *Tetragonula aff. biroi* sebagai obat Covid-19 melalui studi in silico. Dalam penelitian ini, penambatan molekuler antara senyawa propolis dengan masing-masing protease SARS-CoV-2 dan ACE-2 dilakukan. Melalui penelitian ini, dapat disimpulkan bahwa senyawa yang berpotensi menghambat aktivitas protease SARSCoV-2 adalah glyasperin A dan brousoflavonol F, dengan docking score -7,8 kcal/mol dan dengan persentase kemiripan profil interaksi masing-masing dibandingkan dengan inhibitor 13b sebagai kontrol positif sebesar 63% dan 75%. Sementara itu, senyawa yang berpotensi menghambat aktivitas ACE-2 adalah glyasperin A, brousoflavonol F, dan sulabiroins A dengan docking score secara berurutan -10,8 kcal/mol, -9,9 kcal/mol, dan -9,5 kcal/mol serta persentase kemiripan profil interaksi dibandingkan dengan inhibitor MLN-4760 sebagai kontrol positif secara berurutan sebesar 77%, 23%, dan 38%.

.....Coronavirus disease 2019 (COVID-19), a respiratory disease caused by severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2), is a global health concern, as the World Health Organization declared this outbreak to be a global pandemic in March 2020. The need for an effective treatment is urgent because the development of an effective vaccine may take years given the complexity of the virus and its rapid mutation. Two promising treatment targets for COVID-19 are SARS-CoV-2 main protease and ACE-2. Thus, this study examined whether Sulawesi propolis compounds produced by *Tetragonula aff. biroi* can inhibit the enzymatic activity of both proteins. In this study, molecular docking was performed to analyze the interaction profiles of propolis compounds with SARS-CoV-2 main protease and ACE-2 severally. Based on the research, two compounds, namely glyasperin A and brousoflavonol F, are potential inhibitor for SARS-CoV-2 protease with docking score -7.8 kcal/mol and binding similarities compared to inhibitor 13b as positive control 63% and 75% respectively. Furthermore, glyasperin A, brousoflavonol F and sulabiroins A are also considered as potential inhibitors for ACE-2 with docking score -10.8 kcal/mol, -9.9 kcal/mol and -9.5 kcal/mol respectively, and binding similarity compared to inhibitor MLN-4760 as positive control 77%, 23% and 38% respectively.