

Studi elektrokimia dan komputasi umifenovir sebagai sensor COVID-19 = Electrochemical and computational studies of umifenovir as COVID-19 sensor

Deristisya Zahra, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20512856&lokasi=lokal>

Abstrak

COVID-19 atau Coronavirus disease adalah penyakit infeksius yang mudah menular melalui tetesan air liur atau bersin orang yang terinfeksi, sehingga wabah COVID-19 ditetapkan sebagai pandemi oleh WHO pada tanggal 11 Maret 2020. Pencegahan penyebaran virus ini dapat dilakukan dengan tes diagnostik skala besar dan sejauh ini belum dilaporkan pengembangan metode elektrokimia sebagai sensor COVID-19. Umifenovir (Arbidol) adalah salah satu jenis antiviral agent yang dapat berinteraksi dengan spike glikoprotein SARSCoV-2 sehingga dapat berpotensi digunakan sebagai pendeteksi COVID-19. Penelitian ini mempelajari perilaku elektrokimia umifenovir pada screen-printed carbon electrode (SPCE). Hasil pengukuran dengan teknik cyclic voltammetry pada rentang potensial -0,6 V hingga +0,6 V dengan scan rate 50 mV/s dalam 50 mM PBS pH 7,4 menunjukkan bahwa umifenovir bersifat elektroaktif dengan puncak oksidasi dan reduksi pada +0,2 V dan -0,19 V. Puncak oksidasi dan reduksi ini mengalami penurunan arus jika dilakukan penambahan spike glikoprotein pada larutan umifenovir. Penurunan arus mencapai keadaan optimum menggunakan umifenovir 170 μ M, pH 7,4, dan waktu kontak selama 10 menit. Sejalan dengan studi elektrokimia, studi komputasi juga dilakukan untuk mengetahui interaksi molekular antara umifenovir dengan spike glikoprotein SARS-CoV-2. Selektivitas sensor diprediksi melalui simulasi penambatan molekul umifenovir dengan SARS-CoV dan virus Influenza. Hasil penambatan molekul (docking) menunjukkan bahwa kompleks umifenovir dengan SARS-CoV-2 terbentuk spontan dengan nilai $\Delta G_{\text{binding}}$ sebesar -7,7306 kcal/mol. Hasil ini tidak jauh berbeda pada kompleks umifenovir dengan SARSCoV yang memiliki $\Delta G_{\text{binding}}$ sebesar -7,7935 kcal/mol. Hasil tersebut memprediksi adanya kompetisi SARS-CoV-2 dengan SARS-CoV untuk berinteraksi dengan umifenovir.

<hr>

COVID-19 or Coronavirus disease is an infectious disease that can be easily transmitted through droplets of saliva or sneezes of an infected person, so that the COVID-19 outbreak was declared a pandemic by WHO on March 11, 2020. The virus spread can be prevented with large-scale diagnostic tests and so far it has not been reported the development of electrochemical methods as a sensor for COVID-19. Umifenovir (Arbidol) is a type of antiviral agent that can interact with the spike glycoprotein of SARS-CoV-2, thus it has the potential to be used

as a COVID-19 detector. In this study, the electrochemical behavior of umifenovir on a screen-printed carbon electrode (SPCE) is studied.

Measurement results using the cyclic voltammetry technique in a potential range of -0.6 V to +0.6 V with a scan rate of 50 mV/s in 50 mM PBS pH 7.4 indicate that umifenovir is an electroactive molecule with oxidation and reduction peaks at +0.2 V and -0.19 V. Peak current decrease, both in the oxidation and reduction peak current, occurred when the spike glycoprotein was added in the umifenovir solution. Current reduction reached the optimum state using umifenovir $170 \mu\text{M}$, pH 7.4, and contact time for 10 minutes. Computational studies were also conducted to determine the molecular interactions between umifenovir and the spike glycoprotein of SARS-CoV-2. Sensor selectivity was predicted by docking simulations of umifenovir molecules with SARS-CoV and influenza viruses. The docking results showed that the umifenovir complex with SARS-CoV-2 formed spontaneously with a $\Delta G_{\text{binding}}$ value of -7.7306 kcal/mol. These results were not much different with the umifenovir complex with SARS-CoV which had $\Delta G_{\text{binding}}$ of -7.7935 kcal/mol. These results predict SARS-CoV-2 competition with SARS-CoV to interact with umifenovir