

Drug repurposing antivirus dan modifikasinya sebagai senyawa organoselen sebagai inhibitor spike glycoprotein SARS-CoV-2 berbasis molecular docking = Drug repurposing of antivirus and its modifications to organoselenium compounds as SARS-CoV-2 spike glycoprotein inhibitors based on molecular docking

Manaman, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20514437&lokasi=lokal>

Abstrak

SARS-CoV-2 merupakan penyebab COVID-19 yang melanda dunia sejak akhir 2019. Virus ini telah menyebar secara luas di dunia akibat infektifitasnya yang tinggi. Salah satu penyebab tingginya infektifitas virus ini adalah spike glycoprotein. Spike glycoprotein merupakan salah satu protein yang terdapat pada SARS-CoV-2. Spike glycoprotein berperan secara langsung dalam mekanisme infeksi dengan cara membentuk ikatan dengan reseptor ACE-2 pada sel inang. Inhibisi spike glycoprotein dapat menjadi salah satu cara pengobatan COVID-19. Dalam penelitian ini, antivirus yang sudah dipasarkan sebagai basis data akan di-repurpose menjadi antivirus SARS-CoV-2, kemudian dilakukan modifikasi terhadap senyawa yang terpilih menjadi senyawa organoselen. Penelitian dilakukan dengan cara *in silico*. Untuk simulasi molecular docking, digunakan software MOE2014.09 untuk mendapatkan informasi tentang interaksi antara spike glycoprotein dengan ligan, baik antivirus maupun antivirus hasil modifikasi. Melalui analisa nilai energi pengikatan dan uji farmakologi, diperoleh 3 ligan terbaik dari antivirus (Ombitasvir, Elbasvir, dan Ledipasvir) serta antivirus modifikasi (ModL1, ModL2, dan ModL6).

.....SARS-CoV-2 is the cause of COVID-19 that has hit the world since the end of 2019. This virus has spread widely in the world due to its high infection. One of the causes of the high infectivity of this virus is the spike glycoprotein. The spike glycoprotein is a protein found in SARS-CoV-2. The glycoprotein spike directly plays a role in the infection mechanism by forming a bond with the ACE-2 receptor on the host cell. Inhibition of spike glycoprotein can be one way of treating COVID-19. In this study, the antivirals that have been marketed as databases will be repurposed into SARS-CoV-2 antivirals, then the selected compounds will be modified into organoselenium compounds. The research was conducted through *in silico*. The molecular docking simulation was conducted by using MOE2014.09 to retrieve information about the interaction between the protein-ligand from unmodified antivirus as well as modified antivirus. Through the binding energy value and pharmacological tests, the three best ligands are obtained from the unmodified antivirus (Ombitasvir, Elbasvir, and Ledipasvir) and the modified antivirus (ModL1, ModL2, and ModL6).