

Skrining Alkaloid sebagai Inhibitor Spike Glycoprotein SARS-CoV-2 Multivarian melalui Simulasi Penambatan Molekul = Screening of Alkaloids as Multivariate Spike Glycoprotein of SARS-CoV-2 Inhibitor through Molecular Docking Simulation

Samuel Senjaya Tjandra, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920522498&lokasi=lokal>

Abstrak

Akhir-akhir ini dunia dihebohkan dengan merebaknya wabah penyakit COVID 19 yang menyerang seluruh dunia. Virus SARS-CoV-2 menyebabkan penyakit COVID 19. Saat ini, 600 juta orang telah terjangkit penyakit ini di seluruh dunia, dengan 6 juta kasus menyebabkan kematian. Bagian dari virus yang disebut spike (S) glycoprotein berperan dalam perlekatan, fusi, dan masuknya virus ke dalam sel inang.

Penghambatan proses ini bisa menjadi salah satu cara pengobatan COVID-19. Pada penelitian ini, senyawa alkaloid alami telah digunakan sebagai dasar dalam perancangan obat COVID 19 dengan melihat interaksinya dengan glikoprotein S target multivariat SARS-CoV-2 dengan metode simulasi Molecular Docking dengan varian yang digunakan dalam penelitian ini adalah varian Alpha, Beta, Delta, dan Omicron. Tidak ada senyawa alkaloid alami yang dapat berinteraksi dengan keempat varian tersebut berdasarkan hasil yang diperoleh. Namun, telah ditemukan bahwa beberapa senyawa alkaloid alami dapat berinteraksi dengan glikoprotein S lebih dari satu varian, seperti senyawa axelopran sulfat dapat berinteraksi dengan baik dengan Glikoprotein S dalam varian alfa dan beta, dengan nilai pengikatan energi masing-masing sebesar -6,4049 kkal/mol dan -6,5135 kkal/mol. Sebaliknya, benztropine dapat berinteraksi dengan baik dengan varian delta dan omicron dengan nilai energi binding masing-masing sebesar -6,6719 kkal/mol dan -8,9244 kkal/mol.

.....Recently, the world has been shocked by the spread of the COVID-19 disease outbreak that has attacked throughout the world. The SARS-CoV-2 virus causes the COVID-19 disease. Currently, 600 million people have contracted this disease worldwide, with 6 million cases causing death. A part of the virus called the spike (S) glycoprotein plays a role in viruses' attachment, fusion, and entry into host cells. Inhibition of this process can be one way of treating COVID-19. In this study, natural alkaloid compounds have been used as a basis in the design of COVID-19 drugs by looking at their interaction with the S glycoprotein target of multivariate SARS-CoV-2 with the Molecular Docking simulation method with variants used in this study are the Alpha, Beta, Delta, and Omicron variants. No natural alkaloid compounds can interact with the four variants based on the result obtained. However, it has been found that some natural alkaloid compounds can interact with S glycoprotein in more than one variant, such as axelopran sulfate compound can interact well with the S Glycoprotein in alpha and beta variants, with the energy binding values of -6.4049 kcal/mol and -6.5135 kcal/mol, respectively. In contrast, benztropine can interact well with delta and omicron variants with the energy binding values of -6.6719 kcal/mol and -8.9244 kcal/mol, respectively.