

Simulasi Penambatan Molekuler Nanopartikel Tembaga Oksida dan Seng Oksida terhadap Target Enzim RdRp SARS-CoV-2 = Molecular Docking Simulation of Copper Oxide and Zinc Oxide Nanoparticles towards Target Enzyme SARS-CoV-2 RdRp

Muhammad Ariq Yasin, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920559127&lokasi=lokal>

Abstrak

Pandemi COVID-19 yang disebabkan oleh virus SARS-CoV-2 telah menginfeksi lebih dari 2 juta orang di Indonesia, dan lebih dari 60 ribu orang telah meninggal. Urgennya situasi ini mendorong penelitian untuk mencegah penyebaran virus SARS-CoV-2, salah satunya adalah dengan meneliti metode mendesinfeksi permukaan yang terkontaminasi virus SARS-CoV-2 dengan cara menyerang enzim RdRp virus SARS-CoV-2 yang vital terhadap siklus hidupnya. Pada penelitian *in silico* ini dilakukan simulasi penambatan molekuler terhadap dua nanopartikel oksida logam, yaitu tembaga oksida (CuO) dan seng oksida (ZnO). Simulasi penambatan molekuler dilakukan untuk mengetahui nanopartikel yang paling baik dalam menginhibisi enzim RdRp SARS-CoV-2. Hasil penambatan molekuler nanopartikel tembaga oksida dibandingkan dengan hasil penambatan molekuler seng oksida. Hasil penelitian menunjukkan skor penambatan molekuler -5,9 kcal/mol untuk nanopartikel tembaga oksida, dan skor -5,5 kcal/mol untuk nanopartikel seng oksida. Berdasarkan hasil penelitian ini, kedua nanopartikel memiliki potensi sebagai agen antiviral terhadap enzim RdRp SARS-CoV-2, namun nanopartikel tembaga oksida memiliki potensi yang lebih baik.

..... The COVID-19 pandemic caused by the SARS-CoV-2 virus has infected over 2 million people in Indonesia, and has killed over 60 thousand. The urgency of the situation drove researches to prevent the spread of SARS-CoV-2 virus, one of which is a way to disinfect surfaces contaminated by SARS-CoV-2 virus by attacking an enzyme that is important for the virus's life cycle, the RdRp enzyme. This *in silico* research has simulated molecular docking on copper oxide (CuO) and zinc oxide (ZnO) nanoparticles to determine the best nanoparticles for inhibiting the SARS-CoV-2 RdRp enzyme. The two results of molecular docking were compared. The result showed that copper oxide nanoparticles obtained a docking score of -5,9 kcal/mole, while zinc oxide nanoparticles obtained a docking score of -5,5 kcal/mole. Based on the results of this study, it is predicted that both nanoparticles have potential as antiviral agents towards the SARS-CoV-2 RdRp enzyme. However, copper oxide nanoparticles have better potential than zinc oxide nanoparticles.