

# Analisis Simulasi Molekuler Protein Spike Varian SARS-CoV-2 terhadap Reseptornya pada Manusia sebagai Prediktor Transmisi Virus = Molecular Simulation Analysis of SARS-CoV-2 Variantsâ Spike Protein Against Human Receptors and Its Effects on Viral Transmission

Aisyah Fitriannisa Prawiningrum, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20519787&lokasi=lokal>

---

## Abstrak

SARS-CoV-2 merupakan virus RNA dengan panjang genom sekitar 29.891 nukleotida. Pembacaan materi genetik SARS-CoV-2 menggunakan metode Whole Genome Sequencing (WGS) dapat digunakan untuk mengetahui adanya mutasi pada virus. Mutasi pada protein spike SARS-CoV-2 dapat berdampak pada transmisi virus. Interaksi molekuler dari varian yang di Indonesia dievaluasi untuk mempelajari pengaruh mutasi terhadap transmisinya. Sampel yang disekuens di Fakultas Kedokteran Universitas Indonesia (FKUI) dianalisis secara filogenetik untuk menentukan varian dan dibandingkan dengan sebaran varian SARS-CoV-2 di Indonesia. Protein spike dari varian dominan kemudian dimodelkan untuk melihat pengaruh mutasi terhadap struktur 3D protein. Interaksi protein spike dengan ACE2, TMPRSS2, dan Cathepsin L dianalisis menggunakan simulasi molekuler. Berdasarkan sampel dari FKUI, varian yang dominan adalah varian B.1.470, AY.23, AY.24, dan BA.1.1. Analisis simulasi molekuler dari kompleks protein spike varian AY.23, AY.24, dan BA.1.1 dengan ACE2 menunjukkan adanya peningkatan afinitas dan stabilitas dibandingkan dengan strain Wuhan. Analisis simulasi molekuler kompleks protein spike varian BA.1.1 dengan TMPRSS2 dan Cathepsin L mengindikasikan adanya perubahan jalur masuk. Sehingga mutasi yang terjadi pada protein spike varian B.1.470, AY.23, AY.24, dan BA.1.1 menyebabkan perubahan interaksi molekuler yang diprediksi dapat mempengaruhi transmisinya.

.....SARS-CoV-2 is an RNA virus with genome size around 29,891 nucleotides. Reading the genome of SARS-CoV-2 using Whole Genome Sequencing (WGS) method can reveal mutations in the genome. The mutations on SARS-CoV-2 spike protein may have effects on viral transmission. Molecular interaction of the predominant variants in Indonesia were analysed to find the effects of spike mutations to viral transmissibility. The variant of samples from Faculty of Medicine Universitas Indonesia (FMUI) were determined phylogenetically and compared to all variants found in Indonesia. The spike proteins from predominant variants were modelled. Their interactions with human host cell proteins (ACE2, TMPRSS2, and Cathepsin L) were determined by molecular simulations. Based on samples from FMUI, the predominant variants in Indonesia were B.1.470, AY.23, AY.24, and BA.1.1 variants. Based on molecular simulation of spike protein of AY.23, AY.24, and BA.1.1 variants with ACE2, shows increase in affinity and stability of the predominant variants compared to the Wuhan strain. Molecular simulation analysis of spike protein of BA.1.1 variant with TMPRSS2 and Cathepsin L indicates alternative entry pathway. In conclusion, mutations found in the dominant variants modulate their molecular interaction and their transmissibility.