

Penapisan virtual metabolit sekunder Invertebrata Laut Indonesia dengan target Reseptor dan Protease Covid-19 (SARS CoV-2) : ACE2, TMPRSS2 dan 3CLPro = Virtual screening of Indonesian Marine Invertebrates secondary metabolites targeting Covid-19 (SARS CoV-2) Receptor and Proteases : ACE2, TMPRSS2 and 3CLPro

Alfrina Irene, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20524533&lokasi=lokal>

Abstrak

Penyakit coronavirus 2019 (COVID-19) yang disebabkan oleh severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2) telah menjadi keadaan darurat kesehatan medis yang sedang berlangsung di seluruh dunia. Reseptor angiotensin-converting enzyme 2 (ACE2) berfungsi sebagai titik masuk SARS CoV-2, sementara transmembrane protease serine 2 (TMPRSS2) dan 3 chymotrypsin-like protease (3CLPro) terlibat dalam proses lebih lanjut dan replikasi virus. Inhibisi dari reseptor dan protease SARS CoV-2 dapat membatasi penularan virus ini. Penelitian ini dilakukan untuk menemukan kandidat inhibitor ACE2, TMPRSS2, dan 3CLPro dari metabolit sekunder invertebrata laut Indonesia. Metode yang digunakan adalah penapisan virtual dengan target makromolekul yang didapat dari laman RSCB PDB, yaitu ID 2AJF, 7MEQ, dan 6LU7. Kesimpulan penelitian ini adalah bahwa hasil penapisan virtual memperoleh tujuh senyawa uji yang memiliki afinitas ikatan terhadap ketiga target yaitu Pre-neo-kauluamine (-9,7 kkal/mol pada ACE2; -8,4 kkal/mol pada TMPRSS2; -7,8 kkal/mol pada 3CLPro), Nakijiquinone V (-8,2 kkal/mol pada ACE2; -7,8 kkal/mol pada TMPRSS2; -7,5 kkal/mol pada 3CLPro), Acanthomanzamine C (-10,1 kkal/mol pada ACE2; -8,4 kkal/mol pada TMPRSS2; -7,3 kkal/mol pada 3CLPro), Jaspamide Q (-9,5 kkal/mol pada ACE2; -9,2 kkal/mol pada TMPRSS2; -7,3 kkal/mol pada 3CLPro), Saranoside S (-9,7 kkal/mol pada ACE2; -7,7 kkal/mol pada TMPRSS2; -7,2 kkal/mol pada 3CLPro), Acanthomanzamine E (-10,2 kkal/mol pada ACE2; -9,6 kkal/mol pada TMPRSS2; -6,9 kkal/mol pada 3CLPro), dan Jaspamide R (-9,3 kkal/mol pada ACE2; -8,7 kkal/mol pada TMPRSS2; -6,9 kkal/mol pada 3CLPro).

.....The coronavirus disease 2019 (COVID-19) caused by severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-CoV-2) has become an ongoing medical health emergency worldwide. The angiotensin-converting enzyme 2 (ACE2) receptor serves as the entry point for SARS-CoV-2, while transmembrane protease serine 2 (TMPRSS2) and chymotrypsin-like protease 3 (3CLpro) are involved in further processing and viral replication. Inhibition of these SARS-CoV-2 receptor and protease can limit the spread of this virus. This study was conducted to find candidate inhibitors of ACE2, TMPRSS2, and 3CLPro from secondary metabolites of Indonesian marine invertebrates. The method used was virtual screening with macromolecular targets obtained from the RSCB PDB website, namely ID 2AJF, 7MEQ, and 6LU7. Based on the results of virtual screening, seven test compounds were found to have binding affinity towards all three targets, namely Pre-neo-kauluamine (-9.7 kcal/mol on ACE2; -8.4 kcal/mol on TMPRSS2; -7.8 kcal/mol) on 3CLPro), Nakijiquinone V (-8.2 kcal/mol on ACE2; -7.8 kcal/mol on TMPRSS2; -7.5 kcal/mol on 3CLPro), Acanthomanzamine C (-10.1 kcal/mol on ACE2; -8.4 kcal/mol on TMPRSS2; -7.3 kcal/mol on 3CLPro), Jaspamide Q (-9.5 kcal/mol on ACE2; -9.2 kcal/mol on TMPRSS2; -7.3 kcal /mol on 3CLPro), Saranoside S (-9.7 kcal/mol on ACE2; -7.7 kcal/mol on TMPRSS2; -7.2 kcal/mol on 3CLPro), Acanthomanzamine E (-10.2 kcal/mol on ACE2; -9.6 kcal/mol on TMPRSS2; -6.9 kcal/mol on 3CLPro),

and Jaspamide R (-9.3 kcal/mol on ACE2; -8.7 kcal/mol on TMPRSS2; -6.9 kcal/mol at 3CLPro).