

Simulasi Penambatan dan Dinamika Molekuler Senyawa Kimia pada Tanaman Herbal *Phyllanthus Niruri* Linn (Meniran Hijau) terhadap Target Main Protease (Mpro) SARS-CoV-2 = Simulation of Molecular Docking and Molecular Dynamics of Chemical Compounds in Herbal Plants *Phyllanthus Niruri* Linn (Green Meniran) against the Main Protease (Mpro) of SARS-CoV-2

Syarafina Ramadhanisa Kurnianto, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20529171&lokasi=lokal>

Abstrak

Penyakit COVID-19 merupakan penyakit infeksi yang diakibatkan oleh SARS-CoV-2 yang menyerang saluran pernapasan. Hingga saat ini belum ditemukan obat penyembuh COVID-19 dan upaya yang dilakukan ialah pemberian vaksin sehingga perlu adanya peningkatan imunitas manusia. Mpro SARS-CoV-2 merupakan enzim yang berfungsi untuk replikasi virus di sel inang, sehingga dapat menjadi target inhibisi. Pada penelitian ini dilakukan simulasi *in silico* terhadap senyawa flavonoid pada tumbuhan meniran hijau, yaitu Astragalina, Isoquercitrin, Quercitrin, dan Rutin dengan Quercetin sebagai ligan kontrol. Analisis prediksi ADMET menunjukkan bahwa semua ligan menunjukkan potensi yang aman untuk digunakan sebagai obat pada manusia, kecuali Rutin. Keempat ligan menunjukkan skor yang baik pada hasil penambatan molekuler dimana memiliki skor penambatan dan MM-GBSA yang lebih rendah dibanding Quercetin. Studi dinamika molekuler selama 20 ns menunjukkan bahwa semua ligan memiliki kestabilan interaksi yang baik dengan Quercetin dan Isoquercitrin cenderung memiliki kestabilan yang paling baik. Secara keseluruhan dihasilkan bahwa Isoquercitrin menunjukkan potensi yang lebih baik sebagai inhibitor Mpro SARS-CoV-2 dengan skor penambatan -11,973 kcal/mol, rata-rata RMSD 1,652Å, nilai RMSF tertinggi 2,12Å, berinteraksi dengan 25 residu protein, dan memiliki 12 torsi dengan strain energy 0,748 kcal/mol.

.....COVID-19 is an infectious disease caused by SARS-CoV-2 which attacks the respiratory tract as the main target. Until now, no cure for COVID-19 has been found and the efforts made are vaccines distribution, so it is necessary to increase daily human immunity. Mpro SARS-CoV-2 is an enzyme for viral replication in host cells, so it can be a target of inhibition. In this study, an *in-silico* simulation of flavonoid compounds in green meniran plants was carried out, namely Astragalina, Isoquercitrin, Quercitrin, and Rutin with Quercetin as a control ligand. Predictive analysis of ADMET properties showed that all ligands showed good safety for use as drugs in humans, except Rutin. The four ligands showed good scores on molecular docking results which had lower binding scores and MM-GBSA than Quercetin. Molecular dynamics simulation for 20 ns showed that all ligands had good interaction stability and Quercetin and Isoquercitrin tended to have the most stable interaction. Overall, it was found that Isoquercitrin showed better potential as an Mpro SARS-CoV-2 inhibitor with a binding score of -11.973 kcal/mol, an average RMSD of 1.652Å, the highest RMSF value of 2.12Å, interacted with 25 protein residues, and had 12 torque with a strain energy of 0.748 kcal/mol.