

Studi Penambatan Molekuler 30 Senyawa dalam Propolis *Tetragonula sapiens* dengan Target Protein Terapeutik COVID-19 = Molecular Docking Study of 30 Compounds in Propolis *Tetragonula sapiens* with Therapeutic Protein Target for COVID-19

Safira Candra Asih, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920531206&lokasi=lokal>

Abstrak

Sejak pertama kali diidentifikasi pada akhir Desember 2019, COVID-19 menjadi perhatian utama dunia. Sampai saat ini baru ada 2 obat yang disetujui oleh FDA, sehingga masih terbuka kesempatan eksplorasi obat untuk COVID-19. Enzim RNA-dependent RNA polymerase (RdRp) dan p21-activated kinase (PAK1) menjadi kandidat protein target untuk pencarian obat COVID-19. RdRp sendiri terlibat dalam replikasi virus SARS-CoV-2 di dalam tubuh sedangkan PAK1 terlibat dalam patogenesis dan fibrosis paru pada pasien COVID-19. Kedua protein target ini dijadikan strategi pencarian obat dengan mencari inhibitor dari keduanya menggunakan metode penambatan molekuler terhadap 30 senyawa yang ada dalam propolis *Tetragonula sapiens* yang telah terbukti di beberapa penelitian memiliki efek farmakologis. Sebelum dilakukan penambatan molekuler, 30 senyawa propolis dipastikan telah memenuhi aturan Lipinski & SwissADME. Hasil yang didapatkan berdasar analisis docking score, konstanta inhibisi, dan profil interaksi adalah bahwa senyawa propolis yang berpotensi menjadi inhibitor PAK1 adalah glyurallin B dan glyasperin A. Sedangkan untuk RdRp adalah 1,5-Dimethyl-4-[[2-methyl-6-phenylthieno[2,3-d]pyrimidin-4-yl)hydrazinylidene]methyl]pyrrole-2 carbonitrile. Berdasarkan analisis studi literatur, senyawa-senyawa dalam propolis cenderung bersifat sinergis sehingga akan lebih baik digunakan secara kolektif dibanding secara individu. Hasil penelitian ini juga menunjukkan potensi propolis dikembangkan menjadi terapeutik untuk COVID-19 dalam bentuk nutritional foods.

.....Sejak pertama kali diidentifikasi pada akhir Desember 2019, COVID-19 menjadi perhatian utama dunia. Sampai saat ini baru ada 2 obat yang disetujui oleh FDA, sehingga masih terbuka kesempatan eksplorasi obat untuk COVID-19. Enzim RNA-dependent RNA polymerase (RdRp) dan p21-activated kinase (PAK1) menjadi kandidat protein target untuk pencarian obat COVID-19. RdRp sendiri terlibat dalam replikasi virus SARS-CoV-2 di dalam tubuh sedangkan PAK1 terlibat dalam patogenesis dan fibrosis paru pada pasien COVID-19. Kedua protein target ini dijadikan strategi pencarian obat dengan mencari inhibitor dari keduanya menggunakan metode penambatan molekuler terhadap 30 senyawa yang ada dalam propolis *Tetragonula sapiens* yang telah terbukti di beberapa penelitian memiliki efek farmakologis. Sebelum dilakukan penambatan molekuler, 30 senyawa propolis dipastikan telah memenuhi aturan Lipinski & SwissADME. Hasil yang didapatkan berdasar analisis docking score, konstanta inhibisi, dan profil interaksi adalah bahwa senyawa propolis yang berpotensi menjadi inhibitor PAK1 adalah glyurallin B dan glyasperin A. Sedangkan untuk RdRp adalah 1,5-Dimethyl-4-[[2-methyl-6-phenylthieno[2,3-d]pyrimidin-4-yl)hydrazinylidene]methyl]pyrrole-2 carbonitrile. Berdasarkan analisis studi literatur, senyawa-senyawa dalam propolis cenderung bersifat sinergis sehingga akan lebih baik digunakan secara kolektif dibanding secara individu. Hasil penelitian ini juga menunjukkan potensi propolis dikembangkan menjadi terapeutik untuk COVID-19 dalam bentuk nutritional foods.