

INTISARI

Angkininta Ayu Winih Kinasih¹, Ahwan², Fadilah Qonitah³
^{1,2,3} Universitas Sahid Surakarta
¹angkinbolukukus@gmail.com, ²ahone.far02@gmail.com,
³fadilahqonitah@usahidsolo.ac.id

Covid-19 merupakan penyakit yang disebabkan *coronavirus* jenis baru (*SARS-CoV-2*) di akhir tahun 2019. Sampai saat ini tidak ada obat khusus yang tersedia untuk mengobati penyakit ini. Pengobatan tradisional telah memainkan peran positif dalam memerangi *Covid-19*. Beberapa senyawa aktif mulai dilakukan penelitian untuk menangkal virus *Covid-19* salah satunya adalah senyawa kurkumin. Kurkumin merupakan senyawa aktif dari tanaman kunyit dan temulawak. Berdasarkan penelitian dilaporkan kurkumin dapat menghambat agregasi trombosit, anti-diabetes, anti-tumor, efek anti-inflamasi, efek *antioxidant*, dan antivirus. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui interaksi antara senyawa kurkuminoid terhadap enzim *main protease 6LU7* dari *SARS CoV-2* serta senyawa kurkuminoid yang dapat berikatan dengan enzim *main protease 6LU7* dari *SARS CoV-2*. Penelitian ini termasuk jenis penelitian eksperimental secara *in silico*. Hasil penelitian ini diperoleh senyawa uji kurkumin dan turunannya yaitu kurkumin, bisdemetoksikurkumin, dan demetoksikurkumin telah memenuhi syarat hukum *Lipinski Rule of Five*. Bisdemetoksikurkumin memiliki kemampuan sebagai antivirus *SARS-CoV-2* karena memiliki persamaan residu asam amino paling banyak dengan ligan pembanding (Favipiravir) yaitu residu ASN A:142; GLY A:143; CYS A:145; HIS A:163; HIS A:172; LEU A:141; SER A:144; GLU A:166; PHE A:140 dengan *docking score* sebesar -6,7 kkal/mol.

Kata Kunci : Enzim Protease *6LU7*; *SARS-CoV-2*; Senyawa Kurkuminoid; *In Silico* Asam Amino

ABSTRACT

Angkininta Ayu Winih Kinasih¹, Ahwan², Fadilah
Qonitah³

^{1,2,3} Sahid Surakarta University

¹angkinbolukukus@gmail.com,

²ahone.far02@gmail.com,

³fadilahqonitah@usahidsolo.ac.id

Covid-19 is a disease caused by a new type of coronavirus (SARS-CoV-2) at the end of 2019. There is no specific drug available to treat this disease. Traditional medicine contributes to a positive role in overcoming Covid-19. Research has involved active compounds to ward off the Covid-19 virus such as curcumin. Curcumin is an active compound from turmeric and curcuma plants. Based on research, curcumin can inhibit platelet aggregation, anti-diabetic, anti-tumour, anti-inflammatory, antioxidant, and antiviral effects. This study aims to determine the interaction between curcuminoid compounds on the main protease 6LU7 enzyme from SARS CoV-2 and curcuminoid compounds related to the main protease 6LU7 enzyme from SARS CoV-2. This research is an *in silico* experimental study. The results show that curcumin and its derivatives, namely curcumin, bisdemethoxycurcumin, and demethoxycurcumin appropriate the legal requirements of the *Lipinski* Rule of Five. Bisdemethoxycurcumin can be an antiviral for SARS-CoV-2 because it has the most amino acid residues with the reference ligand (Favipiravir), namely residue ASN A:142; GLY A:143; CYS A:145; HIS A:163; HIS A:172; LEU A:141; SER A:144; GLU A:166; PHE A:140 with a docking score of -6.7 kcal/mol.

Keywords: Protease Enzyme 6LU7; SARS-CoV-2; Curcuminoids; *In Silico*
AminoAcids

