

ABSTRAK

COVID-19 pertama kali ditemukan di Wuhan, Cina. Penyakit yang disebabkan oleh virus SARS-CoV-2 ini menyebar luas dan cepat menyebabkan pandemi. WHO menetapkan *variant of concern* (VOC) SARS-CoV-2 menjadi *alpha*, *beta*, *gamma*, *delta* dan *omicron*. Omicron memiliki lebih dari 30 mutasi pada *spike* yang menyebabkan meningkatnya afinitas ikatan, transmisi lebih tinggi, resisten terhadap vaksin, dan mampu menetralkan sistem imun, sehingga angka reinfeksi lebih tinggi. *Receptor-binding domain* (RBD) *spike* berperan dalam membentuk ikatan dengan reseptor *human angiotensin converting enzyme 2* (ACE2), sedangkan *RNA-dependent RNA polymerase* (RdRp) memiliki peran dalam proses sintesis RNA virus, hal ini penting untuk proses replikasi / transkripsi virus. Penelitian ini bertujuan untuk melakukan penapisan senyawa fitokimia herbal Indonesia yang berpotensi sebagai terapi SARS-CoV-2 dengan menghambat *spike* dan RdRp. Dari 6776 fitokimia, terdapat 5820 fitokimia yang memenuhi kriteria dan dilakukan *molecular docking* menggunakan *Autodock Vina*. Analisis sifat mirip obat dan profil ADMET (adsorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi dan toksisitas) dilakukan pada 10 fitokimia terbaik. Glycobismine F memiliki afinitas ikatan tertinggi dengan *spike* BA.4/5 yaitu -9.2 kkal/mol, memiliki 6 ikatan hidrogen. Sedangkan glycobismine G merupakan fitokimia yang berikatan dengan RdRp dengan afinitas yaitu -11.1 kkal/mol, memiliki 6 ikatan hidrogen. Glycobismine F dan Glycobismine G dapat ditemukan pada tanaman *Glycosmis citrifolia* dan *Glycosmis pentaphyll*.

Kata kunci: *molecular docking*, omicron, *spike* glikoprotein, *RNA-dependent RNA polymerase*, fitokimia herbal Indonesia

ABSTRACT

COVID-19 was first discovered in Wuhan, China. The disease caused by the SARS-CoV-2 that spread widely and quickly caused a pandemic. WHO determines the variant of concern (VOC) of SARS-CoV-2 to be alpha, beta, gamma, delta and omicron. Omicron has more than 30 mutations in the spike which causes increased binding affinity, higher transmissibility, vaccine resistance, and is able to neutralize immune system, resulting in higher reinfection rates. Receptor-binding domain (RBD) of spike forming a bond with the human angiotensin converting enzyme 2 (ACE2) receptor, while RNA-dependent RNA polymerase (RdRp) has a role in the process of RNA synthesis, which is important for the viral replication/transcription process. This study aims to screening Indonesian herbal phytochemical compounds that have potential as SARS-CoV-2 therapy by inhibiting spike and RdRp. Of the 6776 phytochemicals, 5820 phytochemicals met the criteria and molecular docking was carried out using Autodock Vina. Analysis of drug-like properties and ADMET profiles (adsorption, distribution, metabolism, excretion and toxicity) were performed on the 10 best phytochemicals. Glycobismine F has the highest binding affinity with spike BA.4/5 which is -9.2 kcal/mol, and has 6 hydrogen bonds. While glycobismine G binds to RdRp with binding affinity of -11.1 kcal/mol, having 6 hydrogen bonds. Glycobismine F and Glycobismine G can be found in *Glycosmis*

citrifolia and *Glycosmis pentaphyll*.

Keywords: molecular docking, omicron, spike glycoprotein, RNA-dependent RNA polymerase, Indonesian herbal phytochemical