

BAB I. PENDAHULUAN

1.1. Latar belakang

Serve Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2 (SARS-CoV-2) atau yang disebut virus korona penyebab sindrom pernafasan akut berat yang di kenal sebagai *Coronavirus Disease 2019* (COVID-19) (Sanders, Monogue, Jodlowski, & Cutrell, 2020). Virus ini pertama kali menyebar di Kota Wuhan, China. Tetapi sudah berkembang menjadi pandemi karena dengan cepat menyebar ke seluruh dunia (Zhou dkk., 2020). Kasus pasien yang terinfeksi COVID-19 di dunia mencapai 261.435.768 jiwa dan telah menyebabkan 5.207.634 kematian. Kasus COVID-19 di Indonesia mencapai 4.280.248 jiwa dan 144.201 meninggal dunia (World Health Organization, 2021).

Sampai saat ini penyakit COVID-19 dapat di tangani sementara dengan pengobatan kimia dan konvalen (Dea, Putri, & Sukohar, 2021). Tetapi karena patogenesis yang sangat tinggi dari virus SARS-CoV-2 belum ada obat yang efektif untuk terapi bagi masyarakat yang terinfeksi. Hanya sedikit obat yang tersedia untuk mengendalikan virus SARS-CoV-2 (Carossino, Thiry, de la Grandière, & Barrandeguy, 2014).

Salah satu target yang menarik untuk pengembangan obat SARS-CoV-2 adalah protein *spike*. Protein ini berperan penting dalam proses infeksi di dalam tubuh manusia. Protein *spike* menempel pada reseptor *angiotensin converting enzyme 2* (ACE2) untuk memfasilitasi virus memasukan materi genetik. Protein *spike* merupakan bagian struktur dari virus SARS-CoV-2 yang menyerupai paku (Hoffmann dkk., 2020).

Oleh karena itu, protein *spike* akan menjadi target yang menarik untuk pengembangan obat baru karena fleksibilitasnya yang tinggi, terutama dalam domain pengikatan reseptor (Henderson dkk., 2020). Berdasarkan penelitian yang dilakukan oleh Vivar-sierra dkk., 2021, kandungan asam lemak tak jenuh yaitu omega 3 diduga mampu mengikat protein *spike* SARS-CoV-2. Ketika omega 3 dapat mencegah protein *spike* berinteraksi dengan ACE2 sehingga dapat membantu mengurangi infeksi.

Beberapa spesies *Navicula sp* memiliki potensi besar sebagai agen antivirus (Ahmadi, Zorofchian Moghadamtousi, Abubakar, & Zandi, 2015). *Navicula sp* memiliki kandungan lemak yang cukup tinggi (Markou, Chatzipavlidis, & Georgakakis, 2012). *Navicula salinicola* mengandung (EPA) (C20:5) 25,58 % total asam lemak (Etesami dkk., 2017). Mikroalga laut ini merupakan fitoplankton yang paling melimpah di lingkungan perairan. *Navicula salinicola* termasuk dalam kelas *Diatomaceae* (Markou dkk., 2012). Karena adanya sumber omega 3

(lipid) yang terkait dengan aktivitas tersebut (Etesami dkk., 2017). Sehingga, Berdasarkan paparan dan potensi besar dari mikroalga, maka akan dilakukan penelitian dengan metode penambatan molekul dan dinamika molekul dalam mengembangkan penemuan anti SARS-CoV-2 pada target protein *spike* oleh asam lemak tak jenuh dari *Navicula salinicola*.

Penambatan dan dinamika molekul menjadi pendekatan untuk menentukan afinitas dan stabilitas interaksi antara ligan dan protein target (Sliwoski, Kothiwale, Meiler, & Lowe, 2014). Penambatan molekul dapat menyediakan protein dengan orientasi situs pengikatan ligan dan energi untuk membentuk kompleks yang stabil. Dinamika molekul menyediakan kompleks yang stabil antara ligan dan protein dari waktu ke waktu dalam kondisi yang mendekati kondisi fisiologis tubuh manusia (Prieto-Martínez, Arciniega, & Medina-Franco, 2018).

1.2. Rumusan masalah

1. Identifikasi pengikatan dan interaksi antara senyawa asam lemak tak jenuh pada *Navicula salinicola* dengan protein *spike* yang ditemukan pada SARS-CoV-2?
2. Seberapa stabil pengikatan asam lemak tak jenuh *Navicula salinicola* ke protein *spike* dengan simulasi dinamika molekul?

1.3. Tujuan dan manfaat penelitian

1. Identifikasi interaksi antara asam lemak tak jenuh pada *Navicula salinicola* dengan protein *spike* yang ditemukan pada SARS-CoV-2.
2. Identifikasi stabilitas ikatan terhadap senyawa asam lemak tak jenuh dengan target protein *spike* dengan simulasi dinamika molekul.

1.4. Hipotesis penelitian

1. Dugaan interaksi antara asam lemak tak jenuh di *Navicula salinicola* dan protein *spike* yang ditemukan di SARS-CoV-2.
2. Asam lemak tak jenuh *Navicula salinicola* diduga memiliki interaksi yang stabil dengan protein *spike* yang ditemukan pada SARS-CoV-2.

1.5. Tempat dan waktu Penelitian

Penelitian dilaksanakan di Laboratorium Kimia Komputasi, Jl Universitas Bhakti Kencana, pada bulan Februari - Juni 2022. Soekarno-Hatta No.754, Cibiru, Bandung, Jawa Barat.