

LITERATUR PENGGUNAAN MOLECULAR DOCKING DALAM IDENTIFIKASI SENYAWA POTENSIAL SEBAGAI AGEN ANTI-SARS-COV-2

Zahratunnisa Ahmad^{1*}, Saeful Amin²

Program Studi Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya, Indonesia
zahratunnisa2002@gmail.com

Received: 10-05- 2025

Revised: 25-05-2025

Approved: 10-06-2025

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi senyawa alami dan sintetik sebagai agen anti-SARS-CoV-2 melalui pendekatan *molecular docking*. Metode yang digunakan adalah tinjauan pustaka sistematis dengan pengumpulan data dari artikel ilmiah yang memuat hasil studi interaksi senyawa terhadap protein target utama virus SARS-CoV-2, yaitu protease utama (*Mpro*) dan RNA-dependent RNA polymerase (*RdRp*). Analisis dilakukan dengan membandingkan afinitas ikatan (*binding affinity*) senyawa terhadap situs aktif protein target menggunakan parameter energi ikatan (*binding energy*) yang dihasilkan dari simulasi *docking*. Hasil penelitian menunjukkan bahwa beberapa senyawa alami seperti naringin, quercetin, dan gliomastin A memiliki afinitas ikatan yang cukup tinggi terhadap protein target virus. Selain itu, senyawa sintetik seperti forodesine-TP dan benzimidazol juga menunjukkan potensi yang menjanjikan, dengan benzimidazol memiliki energi ikatan terendah sebesar -10,523 kcal/mol, yang mengindikasikan interaksi yang kuat dan stabil dengan protein target. Temuan ini mengonfirmasi efektivitas *molecular docking* sebagai metode awal dalam penyaringan kandidat obat antivirus, meskipun hasilnya masih bersifat prediktif dan memerlukan validasi lebih lanjut melalui uji eksperimental *in vitro* dan *in vivo*. Dengan demikian, studi ini tidak hanya memperkaya data senyawa antivirus potensial tetapi juga mendukung penggunaan pendekatan komputasi dalam mempercepat proses penemuan obat baru untuk pengobatan COVID-19.

Kata Kunci: *Molecular docking, SARS-CoV-2, in silico, senyawa alami, senyawa sintetik*

ABSTRACT

This study aims to evaluate the potential of natural and synthetic compounds as anti-SARS-CoV-2 agents through a *molecular docking* approach. The method used is a systematic literature review with data collection from scientific articles containing the results of studies on the interaction of compounds with the main target proteins of the SARS-CoV-2 virus, namely the main protease (*Mpro*) and RNA-dependent RNA polymerase (*RdRp*). The analysis was carried out by comparing the binding affinity of the compounds to the active site of the target protein using the binding energy parameters generated from the docking simulation. The results showed that several natural compounds such as naringin, quercetin, and gliomastin A have quite high binding affinity to the target protein of the virus. In addition, synthetic compounds such as forodesine-TP and benzimidazole also showed promising potential, with benzimidazole having the lowest binding energy of -10.523 kcal/mol, indicating a strong and stable interaction with the target protein. These findings confirm the effectiveness of *molecular docking* as an initial method in screening antiviral drug candidates, although the results are still predictive and require further validation through *in vitro* and *in vivo* experimental tests. Thus, this study not only enriches the data of potential antiviral compounds but also supports the use of computational approaches in accelerating the process of discovering new drugs for the treatment of COVID-19.

Keywords: *Molecular docking, SARS-CoV-2, in silico, natural compounds, synthetic compounds*

PENDAHULUAN

Sejak akhir tahun 2019, dunia telah menghadapi sebuah tantangan kesehatan masyarakat yang sangat serius, yaitu pandemi COVID-19 yang disebabkan oleh infeksi virus SARS-CoV-2. Pandemi ini tidak hanya berdampak pada aspek kesehatan individu, tetapi juga mengguncang sistem kesehatan global secara keseluruhan, menyebabkan lonjakan angka penularan dan kematian di berbagai

belahan dunia. Kondisi ini mendorong adanya kebutuhan yang sangat mendesak untuk mengembangkan terapi medis yang efektif guna mengatasi penyebaran virus dan mengurangi tingkat fatalitas akibat infeksi (Zhou et al., 2020).

Walaupun vaksin COVID-19 telah berhasil dikembangkan dan didistribusikan secara luas ke masyarakat dunia, kenyataannya upaya ini masih menghadapi berbagai kendala. Salah satu tantangan utama adalah munculnya varian-varian baru virus SARS-CoV-2 yang memiliki mutasi genetik, sehingga berpotensi mengurangi efektivitas vaksin yang sudah ada. Selain itu, angka kasus baru yang terus bertambah menunjukkan bahwa vaksinasi saja belum cukup untuk sepenuhnya mengendalikan pandemi ini. Oleh karena itu, pengembangan obat antivirus yang spesifik dan mampu menargetkan mekanisme infeksi virus secara langsung menjadi semakin penting dan mendesak (Cevik et al., 2021).

Dalam konteks inilah, metode *molecular docking* mulai mendapatkan perhatian besar di kalangan peneliti sebagai salah satu pendekatan strategis dalam proses penemuan dan pengembangan obat baru. *Molecular docking* merupakan teknik berbasis komputasi yang bertujuan untuk mensimulasikan dan memprediksi bagaimana molekul kecil yang biasa disebut ligan berinteraksi dengan target biologis tertentu, dalam hal ini protein penting yang dimiliki oleh virus SARS-CoV-2. Beberapa protein target yang sering dianalisis dalam studi *docking* meliputi spike protein, main protease atau Mpro, serta envelope protein. Dengan memahami interaksi ini secara mendetail, peneliti dapat mengidentifikasi senyawa-senyawa potensial yang memiliki kemampuan untuk menghambat aktivitas virus secara spesifik (Kris et al., 2021).

Molecular docking memungkinkan para peneliti untuk menyaring ribuan senyawa alami maupun sintesis secara *in silico* sebelum dilakukan uji laboratorium lebih lanjut. Studi literatur menunjukkan bahwa senyawa dari berbagai sumber, termasuk jambu biji (*Psidium guajava* L.), teh hijau (*Camellia sinensis*), dan bidara Arab (*Zizyphus spina-christa*). Komponen aktif dari tanaman-tanaman ini, seperti catechin gallat, epicatechin gallat, dan zizyphine telah dievaluasi terhadap berbagai target protein SARS-CoV-2 menggunakan perangkat lunak docking memperlihatkan hasil yang menjanjikan sebagai anti-virus (Amin et al., 2025). Contohnya, theaflavin dan catechin dari teh hitam dan hijau menunjukkan energi ikatan minimal -11,8 kcal/mol dan -9,2 kcal/mol terhadap kompleks protein nsp10-nsp16 SARS-CoV-2, yang berperan dalam replikasi virus (Bhardwaj et al., 2022). Hasil docking dianalisis berdasarkan skor afinitas ikatan, jumlah interaksi hidrogen, serta prediksi stabilitas kompleks menggunakan simulasi dinamika molekuler (Biswas et al., 2022).

Beberapa penelitian telah mengidentifikasi senyawa dengan afinitas tinggi terhadap domain reseptor pengikat (RBD) spike protein, Mpro, maupun protein envelope, yang berpotensi menghambat proses masuknya virus ke dalam sel inang atau mengganggu replikasi virus. Selain itu, molecular docking juga digunakan untuk membandingkan efektivitas senyawa alami dan sintesis, serta mengevaluasi parameter farmakokinetik dan toksisitas secara prediktif sebelum uji *in vitro* dan *in vivo* dilakukan (Prayogi et al., 2023). Studi literatur menunjukkan bahwa molecular docking menjadi pilihan utama karena efisiensi biaya dan waktu dibandingkan metode eksperimental tradisional (Karuna Sugito et al., 2023; Prasetyo et al., 2021). Namun, validasi *in vitro* dan *in vivo* tetap diperlukan untuk memastikan keamanan dan efektivitasnya (Tiara Perdana et al., 2021).

Namun, beberapa masalah penelitian masih perlu diatasi. Pertama, disparitas hasil docking antar studi akibat perbedaan parameter simulasi (force field,

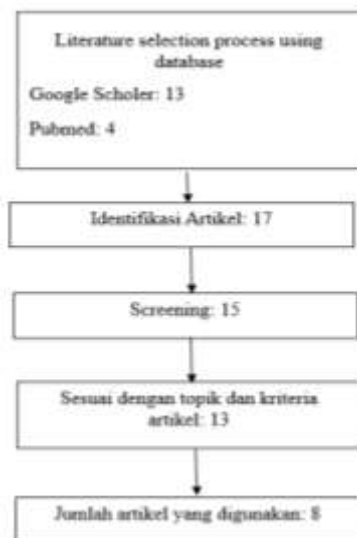
algoritma scoring). Kedua, keterbatasan prediksi stabilitas kompleks protein-ligan tanpa validasi dinamika molekuler jangka panjang. Ketiga, risiko false positive pada senyawa dengan afinitas tinggi tetapi bioavailabilitas rendah, seperti yang terjadi pada luteolin-7-O-glucoside dalam model hewan (Zhang et al., 2024). Oleh karena itu, tinjauan ini bertujuan untuk menganalisis konsistensi metodologi, membandingkan keunggulan senyawa alami vs sintetik, serta mengidentifikasi celah pengetahuan dalam penerapan molecular docking untuk pengembangan anti-SARS-CoV-2.

METODE

Penelitian ini menggunakan pendekatan studi kepustakaan (literature review) dengan fokus pada tinjauan sistematis terhadap artikel ilmiah yang membahas molecular docking, dalam identifikasi senyawa potensial sebagai agen anti-SARS-CoV-2. Proses pengumpulan data dilakukan dengan pencarian literatur secara daring melalui database Google Scholar. Kata kunci yang digunakan dalam pencarian meliputi “in silico”, “molecular docking”, dan “anti-SARS-CoV-2”. Data yang diperoleh dianalisis secara deskriptif untuk mengidentifikasi pola hasil docking, jenis senyawa yang diuji, target protein, serta parameter afinitas ikatan yang digunakan sebagai indikator potensi antivirus. Hasil analisis ini kemudian dirangkum untuk memberikan gambaran komprehensif mengenai efektivitas metode molecular docking dalam penemuan obat anti-SARS-CoV-2.



Gambar 1. Alur penelitian



Gambar 2. Flowchart pencarian literatur

HASIL DAN PEMBAHASAN

Dari hasil penelaahan terhadap sejumlah artikel yang diperoleh, teridentifikasi beberapa studi yang mengkaji pemodelan molecular docking terhadap senyawa-senyawa yang berpotensi sebagai agen Anti-SARS-CoV-2. Rangkuman dari hasil tinjauan literatur tersebut disajikan pada Tabel 1.

Tabel 1. Hasil tinjauan literatur

No	Senyawa	Reseptor	PDB	Energi Ikatan Bebas (kcal/mol)	Referensi
1.	Umnifenovir	NSP 10	7L6T	-6,43	(Amin et al., 2023)
2.	Bisandrographolide C	Main protoase	7S19 7RN4 7NG6 7DPU	-10,3 -10,8 -10 -8,4	(Amin et al., 2024)
3.	Forodesine-TP	RdRp	7BV2	-8,7	(Rabie & Abdalla, 2022)
4.	Naringin	Main Protoase	5RL4 5R7Y 7BUY	-10,13 -9,84 -9,69	(Amin et al., 2022)
5.	Gliomastin A	RdRp	7BV2	-9,6	(Zahran et al., 2020)
6.	3-(5-(pyridine-3-yl)-1,3,4-oxadiazol-2-yl)-2H-chromen-2-imine	Main Protoase	6Y2E	-7,9	(Hashem et al., 2024)
7.	Quercetin	Main Protoase	7VH8	-7,4	(Liang et al., 2023)
8.	2-(thiophen-2-yl)-1-((thiophen-2-yl)methyl)-1H-benzo[d]imidazole	Main Protoase	6LU7	-10,523	(Mudi et al., 2022)

Berdasarkan analisis yang diperoleh dari kajian literatur sebagaimana dirangkum dalam Tabel 1, dapat ditarik kesimpulan bahwa sejumlah senyawa kimia baik yang berasal dari sumber alami maupun hasil sintesis laboratorium,

menunjukkan potensi signifikan sebagai inhibitor terhadap berbagai protein penting yang dimiliki oleh virus SARS-CoV-2. Pendekatan yang digunakan dalam menilai potensi senyawa-senyawa tersebut umumnya adalah *molecular docking*, yakni sebuah metode simulasi komputasi yang memungkinkan peneliti untuk memprediksi dan mengevaluasi sejauh mana afinitas suatu molekul terhadap target protein virus, berdasarkan nilai energi ikatan yang dihasilkan selama interaksi berlangsung (Elfiky, 2020).

Salah satu senyawa yang menarik perhatian dalam hasil kajian ini adalah Umifenovir, suatu obat antivirus yang telah lama digunakan secara klinis dan tersedia di pasaran. Senyawa ini menunjukkan kemampuan berinteraksi dengan protein non-struktural NSP10, yang merupakan bagian dari rangkaian protein penting dalam mekanisme replikasi dan transkripsi virus SARS-CoV-2. NSP10 sendiri merupakan salah satu produk dari translasi genom RNA virus dalam keluarga *Coronaviridae*, dan memainkan peran penting dalam menstabilkan serta mengaktifasi protein lain yang berperan dalam sintesis RNA virus. Interaksi antara Umifenovir dan protein NSP10 menghasilkan nilai energi ikatan bebas sebesar -6,43 kcal/mol, yang mengindikasikan adanya afinitas sedang antara kedua molekul tersebut (Amin et al., 2024).

Selain itu, kajian ini juga menyoroti potensi dari senyawa alami Bisandrographolide C, yang merupakan turunan dari tanaman herbal *Andrographis paniculata*, tanaman yang telah lama digunakan dalam pengobatan tradisional Asia. Senyawa ini menunjukkan interaksi yang sangat kuat terhadap enzim *main protease* (Mpro) dari virus SARS-CoV-2. Enzim Mpro memainkan peranan krusial dalam proses proteolisis, yaitu pemotongan poliprotein virus menjadi protein fungsional yang dibutuhkan untuk replikasi dan perakitan virus baru. Oleh karena perannya yang vital, Mpro menjadi salah satu target utama dalam strategi pengembangan obat antivirus. Berdasarkan simulasi *molecular docking*, interaksi antara Bisandrographolide C dan Mpro menghasilkan energi ikatan bebas yang sangat rendah, berkisar antara -10,8 hingga -8,4 kcal/mol, tergantung pada struktur kristal protein (PDB) yang digunakan sebagai target dalam simulasi. Nilai energi tersebut mencerminkan kekuatan ikatan yang tinggi. Oleh karena itu, senyawa ini layak untuk dikaji lebih lanjut sebagai kandidat potensial dalam pengembangan terapi anti-COVID-19 (Amin et al., 2024).

Forodesine-TP, yaitu senyawa analog nukleosida yang dibuat secara kimia di laboratorium. Berdasarkan hasil studi komputasi menggunakan metode *molecular docking*, senyawa ini menunjukkan kemampuan berinteraksi dengan sangat baik terhadap enzim RNA-dependent RNA polymerase (RdRp) milik virus SARS-CoV-2, dengan nilai energi ikatan bebas sebesar -8,7 kcal/mol. Nilai energi ini menunjukkan adanya afinitas atau kecocokan yang kuat antara Forodesine-TP dan enzim targetnya, yang menjadikan senyawa ini kandidat menjanjikan untuk menghambat proses replikasi virus, yaitu tahapan di mana virus memperbanyak materi genetiknya di dalam sel inang (Rabie & Abdalla, 2022). Enzim RNA-dependent RNA polymerase (disingkat RdRp), yang juga dikenal dengan nama NSP12 pada virus SARS-CoV-2, merupakan komponen utama dalam sistem replikasi virus. Enzim ini bertugas untuk menyalin RNA virus, sehingga virus bisa berkembang biak di dalam tubuh manusia. Karena fungsinya sangat vital dalam siklus hidup virus, RdRp menjadi salah satu sasaran utama dalam pencarian dan pengembangan obat antivirus yang efektif. Dengan menghambat kerja enzim ini, diharapkan laju perkembangbiakan virus bisa ditekan secara signifikan (Muslikh et al., 2023).

Di sisi lain, dari kelompok senyawa alami, terdapat senyawa bernama Naringin yang juga menunjukkan potensi besar. Naringin adalah senyawa flavonoid yang secara alami ditemukan dalam buah-buahan dari keluarga citrus, seperti jeruk dan grapefruit. Dalam uji *molecular docking*, Naringin menunjukkan kemampuan berikatan sangat kuat dengan enzim *main protease* (Mpro) dari virus SARS-CoV-2, yakni enzim yang berperan penting dalam memotong rantai poliprotein virus menjadi bagian-bagian yang lebih kecil dan fungsional. Ikatan antara Naringin dan Mpro memiliki energi ikatan bebas sebesar -10,13 kcal/mol, berdasarkan struktur kristal protein (PDB ID: 5RL4). Nilai ini lebih baik jika dibandingkan dengan senyawa antivirus yang saat ini digunakan sebagai pembanding atau kontrol, seperti remdesivir. Artinya, Naringin berpotensi lebih efektif dalam menghambat aktivitas enzim tersebut (Amin et al., 2022). Oleh karena itu, senyawa ini patut dipertimbangkan lebih lanjut dalam penelitian lanjutan sebagai calon obat dari sumber alami.

Penelitian terbaru menunjukkan bahwa laut tidak hanya menyimpan keanekaragaman hayati yang luar biasa, tetapi juga merupakan sumber potensial senyawa alami dengan aktivitas antivirus yang menjanjikan. Salah satu contohnya adalah senyawa Gliomastin A, yang dihasilkan oleh mikroorganisme laut. Berdasarkan hasil simulasi *molecular docking*, senyawa ini menunjukkan kemampuan yang sangat baik dalam berinteraksi dengan enzim RNA-dependent RNA polymerase (RdRp), yang merupakan enzim penting dalam proses replikasi virus SARS-CoV-2. Gliomastin A memiliki nilai energi ikatan bebas sebesar -9,6 kcal/mol, angka yang menunjukkan kekuatan interaksi yang tinggi antara senyawa ini dan target enzim, sehingga memberikan indikasi kuat bahwa senyawa-senyawa yang berasal dari laut bisa menjadi sumber baru bagi pengembangan agen antivirus masa depan (Zahran et al., 2020).

Di samping itu, kemajuan dalam sintesis kimia juga memungkinkan pengembangan senyawa-senyawa baru dengan aktivitas antivirus yang potensial. Salah satu contohnya adalah senyawa sintesis bernama 3-(5-(pyridin-3-yl)-1,3,4-oxadiazol-2-yl)-2H-chromen-2-imine, yang merupakan hasil modifikasi struktur dari kelompok senyawa oksadiazol. Berdasarkan hasil uji *docking*, senyawa ini menunjukkan afinitas yang cukup baik terhadap enzim *main protease* (Mpro), yaitu salah satu enzim utama dalam proses replikasi virus, dengan nilai energi ikatan sebesar -7,9 kcal/mol. Selain hasil simulasi yang menjanjikan, senyawa ini juga telah diuji secara *in vitro* dan menunjukkan tingkat toksisitas yang rendah, sehingga memberikan peluang besar untuk dikembangkan lebih lanjut sebagai kandidat obat antivirus (Hashem et al., 2024).

Tak hanya senyawa laut atau hasil sintesis laboratorium, senyawa alami dari tumbuhan juga masih menjadi perhatian dalam pencarian obat COVID-19. Salah satu flavonoid yang banyak ditemukan di alam, yaitu Quercetin, telah menunjukkan aktivitas penghambatan yang baik terhadap enzim *main protease* dari virus SARS-CoV-2. Quercetin menghasilkan energi ikatan sebesar -7,4 kcal/mol dalam studi komputasional, yang menandakan kemampuannya dalam mengganggu fungsi enzim tersebut dan berpotensi menghambat replikasi virus (Liang et al., 2023).

Lebih lanjut, sebuah studi lain yang dilakukan oleh Mudi et al., (2022) menemukan bahwa senyawa 2-(thiophen-2-yl)-1-((thiophen-2-yl)methyl)-1H-benzo[d]imidazol memiliki aktivitas penghambatan yang sangat kuat terhadap *main protease*. Dengan nilai energi ikatan bebas sebesar -10,523 kcal/mol, senyawa ini menonjol dibandingkan dengan senyawa lain dalam penelitian

tersebut. Nilai energi yang sangat rendah ini menunjukkan bahwa ikatan yang terbentuk antara senyawa dan enzim target sangat stabil, sehingga besar kemungkinan bahwa senyawa ini dapat secara efektif menghambat kerja enzim dan mencegah replikasi virus secara efisien.

Secara keseluruhan, berbagai data menunjukkan bahwa senyawa alami maupun sintetik memiliki potensi besar sebagai penghambat virus SARS-CoV-2, ditandai dengan nilai energi ikatan bebas di bawah -7 kcal/mol yang mencerminkan kekuatan ikatan yang tinggi dengan target protein virus. Flavonoid seperti naringin dan quercetin menonjol sebagai kandidat alami yang menjanjikan karena mampu berinteraksi kuat dengan enzim utama virus. Pendekatan *in silico*, seperti *molecular docking*, terbukti efektif sebagai metode awal untuk menyaring dan mengevaluasi potensi senyawa antivirus secara cepat dan efisien sebelum dilanjutkan ke tahap pengujian laboratorium.

KESIMPULAN

Berdasarkan hasil penelaahan terhadap berbagai studi *in silico*, dapat disimpulkan bahwa senyawa alami maupun senyawa buatan (sintetik) memiliki potensi besar sebagai agen anti-SARS-CoV-2, terutama terhadap target penting seperti *main protease* (Mpro), RNA-dependent RNA polymerase (RdRp), dan berbagai protein non-struktural lainnya. Beberapa senyawa alami seperti naringin, quercetin, dan gliomastin A menunjukkan kemampuan ikatan yang sangat kuat dengan protein virus. Sementara itu, senyawa sintesis seperti forodesine-TP, turunan oksadiazol, dan benzimidazol thiophen juga memperlihatkan energi ikatan bebas yang cukup rendah serta kestabilan struktur dalam simulasi dinamik, yang menunjukkan efektivitas potensialnya. Salah satu senyawa, yaitu 2-(thiophen-2-yl)-1-((thiophen-2-yl)methyl)-1H-benzo[d]imidazole, mencatat nilai energi ikatan terendah sebesar $-10,523$ kcal/mol, menjadikannya kandidat yang sangat menjanjikan. Temuan-temuan ini menegaskan bahwa metode *molecular docking* sangat berguna sebagai alat awal untuk menyaring dan menilai potensi senyawa antivirus secara cepat dan efisien.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terimakasih kepada Program Studi Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada yang telah mendukung penulisan artikel ini.

DAFTAR PUSTAKA

- Amin, S., Alfarizi, A., Program,), Farmasi, S., Bakti, U., & Husada, T. (2025). Review Artikel Jurnal: Studi Literatur: Molecular Docking Senyawa Anti-Covid-19 Terhadap Enzim 3c-Like Protease. *Indonesian Journal Of Science*, 1(6), 1376–1381.
- Amin, S., Aulia, L., Salsabila, A., & Prasetyo, A. A. (2024). *Pencarian Kandidat Obat Baru Sebagai Inhibitor Main Protease Sars-Cov-2 Dari Senyawa Aktif Tanaman Andrographis Paniculata: Studi In-Silico*. www.Penerbitlitnus.Co.Id
- Amin, S., Rosmiyati, R., Aprillia, A. Y., Adlina, S., & Prasetyo, A. (2023). *Penambatan Senyawa Antivirus Pada Reseptor Non Structural Protein Sebagai Agen Terapeutik Covid-19*. 23(1), 51–61.
- Amin, S., Utami, F., Anandia, S., & Maulidya, I. (2022). Virtual Screening Of Flavonoid Compounds As A Main Protease Inhibitor For Anti-Sars-Cov-2 Candidates Skrining Virtual Senyawa Flavonoid Sebagai Inhibitor Main Protease Untuk Kandidat Anti-Sars-Cov-2. *Indonesian Journal Of Pharmaceutical Science And Technology Journal Homepage*, 9(3), 198–209. [Http://Jurnal.Unpad.Ac.Id/Ijps/](http://Jurnal.Unpad.Ac.Id/Ijps/)
- Bhardwaj, A., Sharma, S., & Singh, S. K. (2022). Molecular Docking Studies To Identify

- Promising Natural Inhibitors Targeting Sars-Cov-2 Nsp10- Nsp16 Protein Complex. *Turkish Journal Of Pharmaceutical Sciences*, 19(1), 93–100. <https://doi.org/10.4274/Tjps.Galenos.2021.56957>
- Biswas, S., Mahmud, S., Mita, M. A., Afrose, S., Hasan, M. R., Sultana Shimu, M. S., Saleh, M. A., Mostafa-Hedeab, G., Alqarni, M., Obaidullah, A. J., & Batiha, G. E. S. (2022). Molecular Docking And Dynamics Studies To Explore Effective Inhibitory Peptides Against The Spike Receptor Binding Domain Of Sars-Cov-2. *Frontiers In Molecular Biosciences*, 8. <https://doi.org/10.3389/fmolb.2021.791642>
- Cevik, M., Tate, M., Lloyd, O., Maraolo, A. E., Schafers, J., & Ho, A. (2021). Sars-Cov-2, Sars-Cov, And Mers-Cov Viral Load Dynamics, Duration Of Viral Shedding, And Infectiousness: A Systematic Review And Meta-Analysis. *The Lancet Microbe*, 2(1), E13–E22. [https://doi.org/10.1016/S2666-5247\(20\)30172-5](https://doi.org/10.1016/S2666-5247(20)30172-5)
- Elfiky, A. A. (2020). Anti-Hcv, Nucleotide Inhibitors, Repurposing Against Covid-19. *Life Sciences*, 248. <https://doi.org/10.1016/j.lfs.2020.117477>
- Hashem, H. E., Ahmad, S., Kumer, A., & Bakri, Y. El. (2024). In Silico And In Vitro Prediction Of New Synthesized N-Heterocyclic Compounds As Anti-Sars-Cov-2. *Scientific Reports*, 14(1). <https://doi.org/10.1038/S41598-024-51443-7>
- Karuna Sugito, S., Uli Cristina, A., Saskia Harimurti, P., Regita Cendani, G., Azhar Insani, F., Authors Syailendra Karuna Sugito, A., Erlina, L., Indah Paramita, R., Fadilah, F., & Med Chem Bio, I. J. (2023). Virtual Screening On Indonesian Herbal Compounds As Sars-Cov-2 Spike (S2) Glycoprotein Inhibitors: Pharmacophore Modelling & Molecular Docking Approaches. *Indonesian Journal Of Medical Chemistry And Bioinformatics*, 1(2). <https://doi.org/10.7454/Ijmcb.V1i2.1006>
- Liang, J., Zheng, Y., Tong, X., Yang, N., & Dai, S. (2023). In Silico Identification Of Anti-Sars-Cov-2 Medicinal Plants Using Cheminformatics And Machine Learning. *Molecules*, 28(1). <https://doi.org/10.3390/Molecules28010208>
- Mudi, P. K., Mahato, R. K., Verma, H., Panda, S. J., Purohit, C. S., Silakari, O., & Biswas, B. (2022). In Silico Anti-Sars-Cov-2 Activities Of Five-Membered Heterocycle-Substituted Benzimidazoles. *Journal Of Molecular Structure*, 1261. <https://doi.org/10.1016/J.Molstruc.2022.132869>
- Muslikh, F. A., Pratama, R. R., Ma'arif, B., & Purwitasari, N. (2023). Studi In Silico Senyawa Flavonoid Dalam Mengambat Rna-Dependent Rna Polymerase (Rdrp) Sebagai Antivirus Covid-19. *Journal Of Islamic Pharmacy*, 8(1), 49–55. <https://doi.org/10.18860/Jip.V8i1.21722>
- Prasetio, N. F., Bodhi, W., Manampiring, A., & Budiarmo, F. (2021). *Molecular Docking Terhadap Senyawa Isoelutherin Dan Isoeleutherol Sebagai Penghambat Pertumbuhan Sars-Cov-2*. 9(1), 101–106. <https://doi.org/10.35790/Ebm.9.1.2021.31809>
- Prayogi, S., Dhiani, B. A., & Djalil, A. D. (2023). Molecular Docking Of Bicycloproline Derivative Synthetic Compounds On Envelope Protein: Anti-Sars-Cov-2 Drug Discovery. *Jurnal Farmasi Dan Ilmu Kefarmasian Indonesia*, 10(1), 11–21. <https://doi.org/10.20473/Jfiki.V10i12023.11-21>
- Rabie, A. M., & Abdalla, M. (2022). Forodesine And Riboprine Exhibit Strong Anti-Sars-Cov-2 Repurposing Potential: In Silico And In Vitro Studies. *Acs Bio And Med Chem Au*, 2(6), 565–585. <https://doi.org/10.1021/Acsbiomedchemau.2c00039>
- Sharon, F. B., & Kris, J. S. (2021). Molecular Docking Study On Sars-Cov-2 Protease Inhibition By Exploring Bioactive Compounds From Different Plants. *International Journal Of Pharmaceutical Sciences And Research*, 12(3), 1823–1833. [https://doi.org/10.13040/Ijpsr.0975-8232.12\(3\).1823-33](https://doi.org/10.13040/Ijpsr.0975-8232.12(3).1823-33)
- Tiara Perdana, A., Aditya Permana, A., Studi Biologi, P., Sains, F., Al-Azhar Indonesia, U., Singingamangaraja Kebayoran Baru Jakarta Selatan, J., & Kunci, K. (2021). Molecular Docking Senyawa Potensial Anticovid-19 Secara In Silico. In *Jika: Vol. Issn*. <http://www.rcsb.org/Pdb>
- Zahran, E. M., Albohy, A., Khalil, A., Ibrahim, A. H., Ahmed, H. A., El-Hossary, E. M., Bringmann, G., & Abdelmohsen, U. R. (2020). Bioactivity Potential Of Marine Natural Products From Scleractinia-Associated Microbes And In Silico Anti-Sars-Cov-2

- Evaluation. In *Marine Drugs* (Vol. 18, Issue 12). Mdpi.
<https://doi.org/10.3390/md18120645>
- Zhou, P., Yang, X. Lou, Wang, X. G., Hu, B., Zhang, L., Zhang, W., Si, H. R., Zhu, Y., Li, B., Huang, C. L., Chen, H. D., Chen, J., Luo, Y., Guo, H., Jiang, R. Di, Liu, M. Q., Chen, Y., Shen, X. R., Wang, X., ... Shi, Z. L. (2020). A Pneumonia Outbreak Associated With A New Coronavirus Of Probable Bat Origin. *Nature*, 579(7798), 270–273.
<https://doi.org/10.1038/S41586-020-2012-7>