MASALIQ
Jurnal Pendidikan dan Sains

e-ISSN: 2808-8115
p-ISSN: 2809-1051

Terindeks: Sinta 5, Copernicus, Dimensions, Scilit, Lens, Crossref, Garuda, Google Scholar, Base, etc

https://doi.org/10.58578/masaliq.v6i3.10091

ANALISIS *MOLECULAR DOCKING* SENYAWA FITOKIMIA TANAMAN OBAT INDONESIA TERHADAP HUMAN RHINOVIRUS VP1 UNTUK TERAPI FLU BIASA

Molecular Docking Analysis of Phytochemical Compounds from Indonesian Medicinal Plants against Human Rhinovirus VP1 for Common Cold Therapy

Mutiara Annisa & Deski Beri
Universitas Negeri Padang
mutiaraannisa2103@gmail.com

Article Info:

Submitted:	Revised:	Accepted:	Published:
Mar 28, 2026	Apr 25, 2026	May 7, 2026	May 12, 2026

Abstract

Although Indonesian traditional medicinal plants have been widely used in natural medicine, molecular docking-based studies on the potential of their bioactive compounds as antiviral agents against Rhinovirus 2R06 still need to be developed. This study aims to examine the potential of bioactive compounds from four Indonesian traditional medicinal plants, namely benzoin (*Styrax benzoin*), turmeric (*Curcuma longa*), gotu kola (*Centella asiatica*), and castor leaves (*Ricinus communis*), as antiviral candidates against Rhinovirus 2R06, one of the main causes of the common cold. This study used a quantitative *in silico*-based approach through the molecular docking method with MOE 2022 software. The analysis was conducted to evaluate the binding affinity and stability of bioactive compound interactions with the target protein based on S-score and RMSD values. The results showed that curcumin and demethoxycurcumin (DMC) had strong binding affinities, as indicated by highly negative S-score values and low RMSD values. Both compounds formed stable interactions with important residues,

Masaliq Journal is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0 International License

such as Leu106 and Val188, through hydrogen bonds. Thus, bioactive compounds from Indonesian traditional medicinal plants, particularly curcumin and DMC, have the potential to be developed as natural therapeutic candidates for respiratory tract infections caused by Rhinovirus 2R06. This study provides an initial basis for the development of phytochemical compound-based antiviral agents, although further experimental validation is required to support their clinical application.

Keywords: Molecular Docking; Rhinovirus 2R06; Curcumin; Phytochemical Compounds; Antiviral Activity

Abstrak: Meskipun tanaman obat tradisional Indonesia telah banyak dimanfaatkan dalam pengobatan alami, kajian berbasis penambatan molekuler terhadap potensi senyawa bioaktifnya sebagai agen antivirus terhadap Rhinovirus 2R06 masih perlu dikembangkan. Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji potensi senyawa bioaktif dari empat tanaman obat tradisional Indonesia, yaitu kemenyan (*Styrax benzoin*), kunyit (*Curcuma longa*), pegagan (*Centella asiatica*), dan daun jarak (*Ricinus communis*), sebagai kandidat antivirus terhadap Rhinovirus 2R06, salah satu penyebab utama flu biasa (*common cold*). Penelitian ini menggunakan pendekatan kuantitatif berbasis *in silico* melalui metode penambatan molekuler dengan perangkat lunak MOE 2022. Analisis dilakukan untuk mengevaluasi afinitas ikatan dan stabilitas interaksi senyawa bioaktif terhadap protein target berdasarkan nilai *S-score* dan RMSD. Hasil penelitian menunjukkan bahwa kurkumin dan demetoksikurkumin (DMC) memiliki afinitas ikatan yang kuat, ditunjukkan oleh nilai *S-score* yang sangat negatif dan RMSD yang rendah. Kedua senyawa tersebut membentuk interaksi stabil dengan residu penting, seperti Leu106 dan Val188, melalui ikatan hidrogen. Dengan demikian, senyawa bioaktif dari tanaman obat tradisional Indonesia, khususnya kurkumin dan DMC, berpotensi dikembangkan sebagai kandidat terapi alami untuk infeksi saluran pernapasan akibat Rhinovirus 2R06. Penelitian ini memberikan dasar awal bagi pengembangan agen antivirus berbasis senyawa fitokimia, meskipun validasi eksperimental lebih lanjut diperlukan untuk mendukung penerapan klinisnya.

Kata Kunci: Penambatan Molekuler; Rhinovirus 2R06; Kurkumin; Senyawa Fitokimia; Aktivitas Antivirus

PENDAHULUAN

Rhinovirus merupakan salah satu virus dari famili *Picornaviridae* yang menjadi penyebab utama infeksi saluran pernapasan bagian atas pada manusia(Badger et al., n.d.). Nama "rhino" berasal dari bahasa Yunani yang berarti "hidung", yang menunjukkan bahwa virus ini umumnya menyerang rongga hidung dan berkembang optimal pada suhu rendah di area tersebut. Kemampuan virus bereplikasi secara cepat pada saluran pernapasan atas menyebabkan rhinovirus menjadi agen utama penyebab *common cold* yang sering dialami masyarakat di berbagai kelompok usia(Djeddi et al., 2024). Salah satu tipe yang cukup banyak dikaji adalah Rhinovirus 2R06, yang termasuk strain penyebab flu biasa dengan tingkat penyebaran tinggi(Bochkov et al., 2011). Meskipun penyakit ini umumnya bersifat *self-limiting*,

infeksi rhinovirus tetap menjadi perhatian karena dapat menurunkan kualitas hidup dan memicu komplikasi pada individu dengan sistem imun lemah(Palmenberg et al., 2009). Hingga saat ini belum tersedia terapi antivirus spesifik yang efektif untuk menghambat infeksi Rhinovirus 2R06 secara langsung(Coultas et al., 2021). Kondisi tersebut menunjukkan bahwa pengembangan kandidat antivirus baru masih sangat diperlukan, terutama yang berasal dari bahan alami dengan efek samping minimal(Royston & Tapparel, 2016).

Pemanfaatan tanaman tradisional sebagai sumber obat alami telah lama menjadi bagian penting dalam pengobatan masyarakat di berbagai negara, termasuk Indonesia(Salehi et al., 2019). Tanaman herbal diketahui memiliki kandungan senyawa bioaktif yang berpotensi memberikan aktivitas farmakologis, seperti antiinflamasi, antimikroba, antioksidan, dan antivirus. Dalam penelitian ini digunakan empat tanaman obat tradisional Indonesia, yaitu kemenyan (*Styrax benzoin*), kunyit (*Curcuma longa*), pegagan (*Centella asiatica*), dan daun jarak (*Jatropha curcas*). Kemenyan dikenal sebagai penghasil resin aromatik dengan kandungan senyawa aktif yang banyak dimanfaatkan dalam bidang pengobatan dan industri parfum(Xia et al., 2023). Kunyit mengandung kurkumin sebagai komponen utama yang telah banyak diteliti karena aktivitas antiinflamasi dan antioksidannya(Fuloria et al., 2022). Pegagan diketahui memiliki manfaat dalam proses penyembuhan luka dan regenerasi jaringan karena kandungan triterpenoid aktifnya(Sun et al., 2020). Sementara itu, daun jarak memiliki senyawa metabolit sekunder yang berpotensi sebagai agen terapeutik dan sumber bioenergi alternatif(Ahmad et al., n.d.).

Perkembangan teknologi komputasi dalam bidang farmakologi mendorong penggunaan metode *in silico* sebagai pendekatan modern dalam identifikasi kandidat obat baru(Cicih et al., n.d.). Pendekatan ini memungkinkan peneliti untuk memprediksi interaksi antara senyawa bioaktif dan protein target secara lebih cepat, efisien, dan ekonomis dibandingkan metode eksperimental konvensional. Beberapa penelitian sebelumnya telah melaporkan potensi kurkumin, asiaticoside, dan senyawa fitokimia lainnya sebagai agen antivirus maupun antiinflamasi(Chen et al., 2022; Li et al., 2019). Penelitian lain juga menunjukkan bahwa metode *molecular docking* efektif digunakan untuk mengevaluasi afinitas ikatan ligan terhadap protein target virus(Reddy & Gupta, 2020). Namun, sebagian besar studi terdahulu masih berfokus pada aktivitas biologis umum dari tanaman herbal tersebut dan belum secara spesifik menganalisis interaksi senyawa bioaktif tanaman tradisional Indonesia terhadap protein Rhinovirus 2R06(Alherbawi et al., 2021). Dengan demikian,

masih terdapat kesenjangan penelitian terkait eksplorasi kandidat inhibitor alami terhadap protein penyebab *common cold* menggunakan pendekatan *molecular docking*.

Penelitian ini menawarkan kebaruan melalui analisis *molecular docking* senyawa fitokimia dari tanaman obat tradisional Indonesia terhadap protein Human Rhinovirus 2R06 sebagai target antivirus. Pendekatan ini didasarkan pada teori interaksi ligan-protein yang menjelaskan bahwa kestabilan kompleks molekuler dapat diprediksi melalui nilai *binding affinity* dan *root mean square deviation* (RMSD). Metode *in silico* memungkinkan dilakukannya *virtual screening* terhadap berbagai senyawa bioaktif untuk menentukan kandidat terbaik berdasarkan kekuatan interaksi molekulernya(Arden et al., 2010). Selain itu, visualisasi struktur tiga dimensi protein juga dapat membantu mengidentifikasi situs aktif yang berperan penting dalam proses penghambatan replikasi virus(Meng et al., n.d.).

Berdasarkan latar belakang tersebut, penelitian ini bertujuan untuk menganalisis potensi senyawa bioaktif dari kemenyan (*Styrax benzoin*), kunyit (*Curcuma longa*), pegagan (*Centella asiatica*), dan daun jarak (*Jatropha curcas*) sebagai kandidat inhibitor protein Human Rhinovirus 2R06 menggunakan metode *molecular docking*. Hasil penelitian diharapkan dapat memberikan kontribusi terhadap pengembangan kandidat antivirus alami berbasis kekayaan hayati Indonesia serta menjadi dasar bagi penelitian eksperimental lanjutan dalam pengembangan terapi *common cold*(Ferreira et al., 2015).

METODE

Jenis Penelitian

Penelitian ini merupakan penelitian komputasional berbasis *in silico* yang menggunakan metode *molecular docking* untuk menganalisis interaksi antara senyawa alami dengan protein target bakteri. Penelitian dilakukan menggunakan perangkat laptop Lenovo Ideapad 3 dengan prosesor AMD Ryzen 3 5300U dan RAM 8 GB pada sistem operasi 64-bit. Perangkat lunak yang digunakan meliputi MOE 2022, Discovery Studio 2024, PyMOL Education 1.3, Protein Data Bank (PDB), PDBSum, dan PubChem sebagai sumber data struktur protein dan ligan.

Desain Penelitian

Tahapan penelitian diawali dengan persiapan protein reseptor bakteri 2R06 menggunakan perangkat lunak MOE 2022 melalui metode QuickPrep dengan nilai

konvergensi energi RMS gradient sebesar 0,01 kcal/mol/Å². Metode Protonate3D diterapkan untuk memprediksi koordinat hidrogen secara otomatis pada struktur tiga dimensi protein.

Selanjutnya dilakukan persiapan ligan berupa asam sinamat, asiaticoside, bisdemethoxycurcumin (BDM), curcumin, demethoxycurcumin (DMC), madecassoside, ricinoleic acid, dan vanilin yang berasal dari produk alami seperti kemenyan, kunyit, pegagan, dan daun jarak. Struktur ligan diperoleh dari basis data PubChem dan diproses menggunakan MOE 2022 melalui tahap pencucian struktur, penambahan atom hidrogen eksplisit, penyesuaian muatan parsial, serta minimisasi energi dengan RMS gradient 0,01 kcal/mol/Å².

Identifikasi sisi aktif protein dilakukan menggunakan MOE 2022 dan diverifikasi berdasarkan literatur serta PDBSum. Visualisasi lokasi *binding site* dilakukan menggunakan PyMOL Education 1.3. Residu asam amino pada sisi aktif yang teridentifikasi meliputi Tyr197, Leu106, Tyr128, Met221, Met224, Tyr152, dan Pro174. Tahap docking dilakukan dengan pendekatan *induced fit* menggunakan MOE 2022 dengan menghasilkan 100 pose untuk setiap ligan, kemudian dipilih konformasi terbaik berdasarkan hasil docking.

Objek Penelitian dan Teknik Sampling

Objek penelitian ini adalah protein reseptor bakteri 2R06 serta beberapa senyawa alami yang berpotensi sebagai ligan, yaitu asam sinamat, asiaticoside, bisdemethoxycurcumin, curcumin, demethoxycurcumin, madecassoside, ricinoleic acid, dan vanilin. Teknik pengambilan sampel dilakukan secara purposive sampling, yaitu pemilihan protein target dan senyawa ligan berdasarkan data literatur, ketersediaan struktur pada basis data PubChem dan PDB, serta potensi aktivitas biologisnya terhadap protein target bakteri.

Instrumen dan Pengumpulan Data

Instrumen penelitian berupa perangkat keras laptop Lenovo Ideapad 3 dan perangkat lunak MOE 2022, Discovery Studio 2024, PyMOL Education 1.3, Protein Data Bank (PDB), PDBSum, dan PubChem. Pengumpulan data dilakukan dengan mengunduh struktur protein dan ligan dari basis data daring, kemudian melakukan preparasi protein dan ligan sebelum proses docking. Data interaksi antara ligan dan protein diperoleh dari hasil simulasi docking dan divisualisasikan dalam bentuk diagram interaksi dua dimensi menggunakan Discovery Studio 2024 Client.

Teknik Analisis Data

Analisis data dilakukan berdasarkan parameter *root mean square deviation* (RMSD) dan energi ikatan bebas (*S score*) dari hasil docking. Nilai S score digunakan untuk menilai kekuatan afinitas ikatan antara ligan dan protein reseptor, di mana semakin negatif nilai S score menunjukkan afinitas ikatan yang semakin kuat. Nilai RMSD digunakan untuk mengevaluasi kesamaan konformasi hasil docking dengan konformasi referensi, dengan nilai RMSD di bawah 3 Å dianggap memenuhi kriteria validitas docking. Selain itu, analisis interaksi molekuler dilakukan terhadap jenis ikatan yang terbentuk, seperti ikatan hidrogen, ikatan karbon-hidrogen, interaksi van der Waals, elektrostatik, dan solvasi menggunakan Discovery Studio 2024 Client.

Penelitian ini dilakukan pada bulan Juli hingga Desember 2024.

HASIL

Penelitian ini mengevaluasi potensi senyawa bioaktif dari tanaman obat tradisional Indonesia terhadap protein Rhinovirus 2R06 menggunakan metode *molecular docking*. Tanaman yang digunakan meliputi kemenyan (*Styrax benzoin*), kunyit (*Curcuma longa*), pegagan (*Centella asiatica*), dan daun jarak (*Ricinus communis*) yang diketahui memiliki manfaat kesehatan dan potensi farmakologis(Swandiny et al., 2023).

Hasil molecular docking menunjukkan adanya variasi nilai binding affinity berdasarkan parameter S score dan RMSD pada masing-masing ligan terhadap protein target. Nilai lengkap hasil docking disajikan pada Tabel 1.

Tabel 1. Hasil molecular docking senyawa fitokimia terhadap protein Human Rhinovirus 2R06

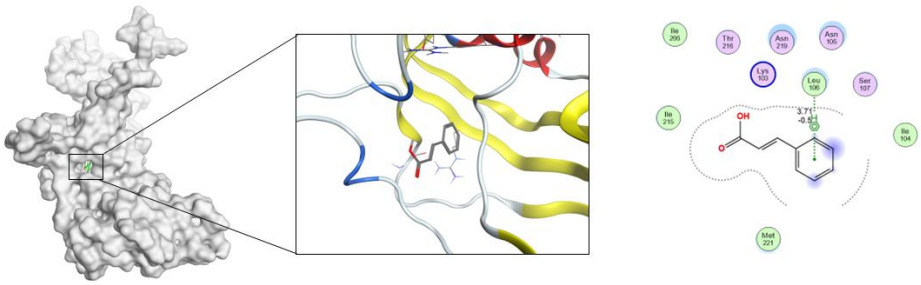
Ligand	S (kcal/mol)	RMSD (Å)	Amino Acid Interaction	Type of Interaction	Bond Distance (Å)
Asam sinamat	-4.9751	3.5940	Leu 106	Hydrogen Bond	3.71
Asiaticoside	-8.4332	4.1537	Leu 193 Val 191 Pro 155	Hydrophobic Bonds	3.27; 3.01 3.00 2.82
Bisdemethoxycurcumin (BDM)	-7.6268	2.3778	Val 188 Met 221	Hydrogen Bond	3.29 4.15
Curcumin	-8.5710	2.9206	Leu 106 Val 188	Hydrogen Bond	3.55 4.17

Ligand	S (kcal/mol)	RMSD (Å)	Amino Acid Interaction	Type of Interaction	Bond Distance (Å)
Dementhoxycurcumin (DMC)	-8.2420	1.3327	Leu 106 Tyr 152	Hydrogen Bond	3.54 3.96
Madecassoside	-7.2241	4.1520	Lys 179 Ala 134 Val 180	Hydrophobic Bonds	2.95 3.22 2.88
Ricinoleic acid	-8.5945	2.8586	-	-	-
Vanilin	-4.9798	1.7440	-	-	-

Berdasarkan Tabel 1, Curcumin menunjukkan nilai S score sebesar -8.5710 kcal/mol dengan RMSD 2.9206 Å serta membentuk ikatan hidrogen dengan residu Leu106 dan Val188. Demethoxycurcumin (DMC) juga menunjukkan hasil yang baik dengan nilai S score -8.2420 kcal/mol dan RMSD 1.3327 Å melalui interaksi dengan residu Leu106 dan Tyr152.

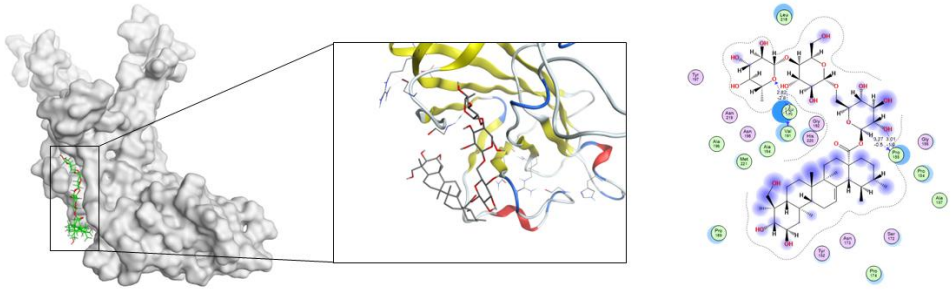
Ricinoleic acid memiliki nilai S score paling rendah yaitu -8.5945 kcal/mol, meskipun tidak ditemukan interaksi spesifik pada residu asam amino. Sebaliknya, asam sinamat dan vanilin menunjukkan afinitas ikatan yang lebih lemah dengan nilai S score masing-masing -4.9751 kcal/mol dan -4.9798 kcal/mol.

Visualisasi interaksi molekuler dilakukan menggunakan Discovery Studio dalam bentuk tampilan 2D dan 3D untuk setiap ligan. Hasil visualisasi interaksi ligan–protein ditampilkan pada Gambar 1–8.



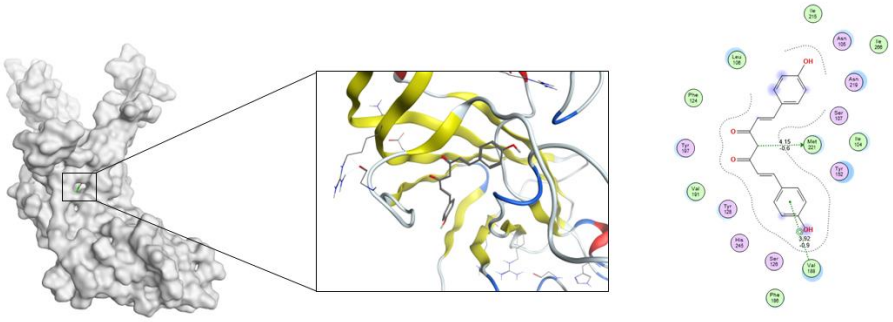
Gambar 1. Visualisasi interaksi 2D dan 3D ligan asam sinamat dengan protein Human Rhinovirus 2R06

Gambar 1 menunjukkan visualisasi interaksi 2D dan 3D antara asam sinamat dan protein Human Rhinovirus 2R06. Pada gambar terlihat bahwa ligan berada pada kantong aktif protein, namun jumlah interaksi yang terbentuk relatif terbatas. Hal ini sejalan dengan nilai binding affinity yang lebih tinggi dibandingkan ligan lain, sehingga menunjukkan afinitas ikatan yang lebih lemah terhadap protein target.



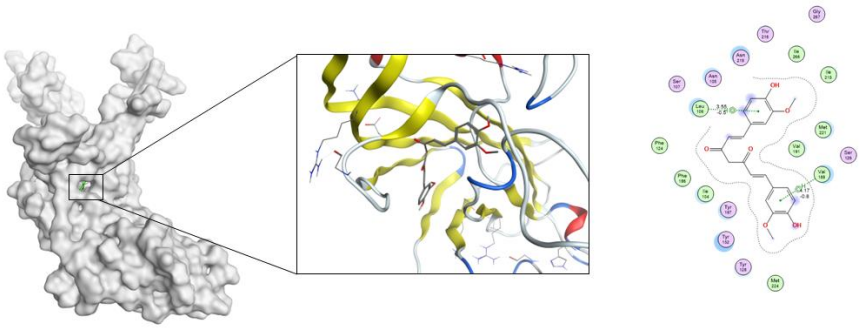
Gambar 2. Visualisasi interaksi 2D dan 3D ligan asiaticoside dengan protein Human Rhinovirus 2R06

Gambar 2 memperlihatkan interaksi 2D dan 3D antara asiaticoside dan protein Human Rhinovirus 2R06. Visualisasi menunjukkan dominasi interaksi hidrofobik dengan beberapa residu asam amino pada sisi aktif protein. Interaksi hidrofobik tersebut berperan dalam stabilisasi kompleks ligan–protein dan menunjukkan potensi asiaticoside sebagai kandidat inhibitor.



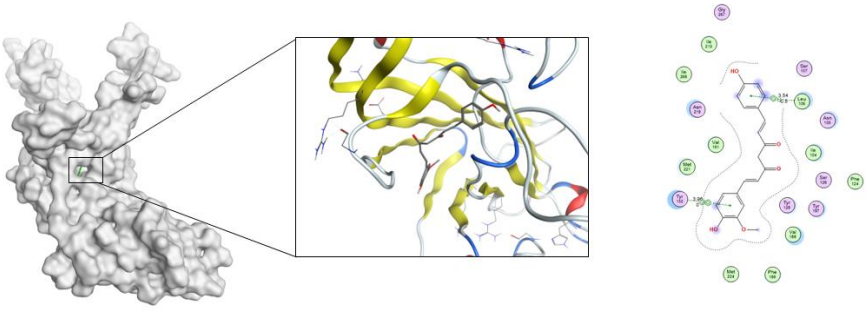
Gambar 3. Visualisasi interaksi 2D dan 3D ligan bisdemethoxycurcumin (BDM) dengan protein Human Rhinovirus 2R06

Gambar 3 menunjukkan visualisasi interaksi bisdemethoxycurcumin dengan protein target. Ligan terlihat menempati binding pocket dengan orientasi yang stabil serta membentuk beberapa interaksi non-kovalen dengan residu di sekitar sisi aktif. Keberadaan interaksi ini menunjukkan kemampuan BDM dalam berikatan dengan protein Rhinovirus 2R06.



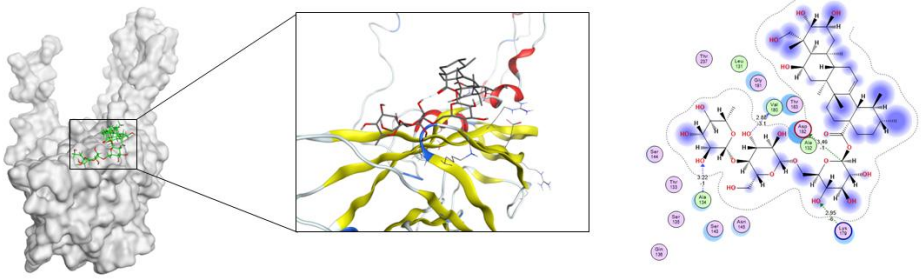
Gambar 4. Visualisasi interaksi 2D dan 3D ligan curcumin dengan protein Human Rhinovirus 2R06

Gambar 4 memperlihatkan interaksi 2D dan 3D antara curcumin dan protein Human Rhinovirus 2R06. Curcumin membentuk ikatan hidrogen dengan residu penting Leu106 dan Val188 pada sisi aktif protein. Interaksi ini menunjukkan kestabilan kompleks ligan–protein yang kuat dan mendukung potensi curcumin sebagai kandidat inhibitor utama Rhinovirus 2R06.



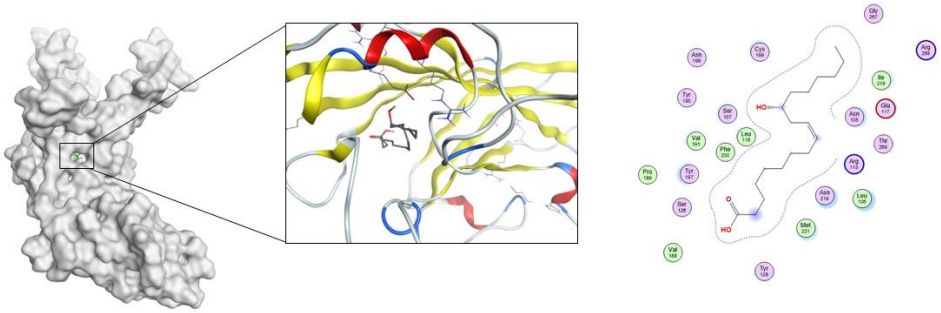
Gambar 5. Visualisasi interaksi 2D dan 3D ligan demethoxycurcumin (DMC) dengan protein Human Rhinovirus 2R06

Gambar 5 menunjukkan interaksi demethoxycurcumin dengan protein target. Ligan membentuk ikatan hidrogen dengan residu Leu106 dan Tyr152 yang berperan penting pada sisi aktif protein. Pola interaksi ini menunjukkan kestabilan kompleks yang baik serta mendukung potensi DMC sebagai kandidat antivirus alami.



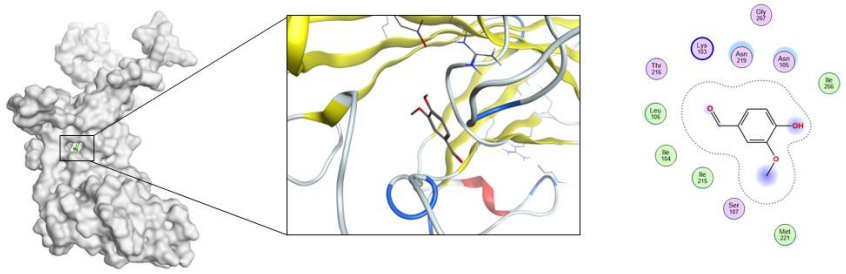
Gambar 6. Visualisasi interaksi 2D dan 3D ligan madecassoside dengan protein Human Rhinovirus 2R06

Gambar 6 memperlihatkan interaksi antara madecassoside dan protein Human Rhinovirus 2R06. Visualisasi menunjukkan dominasi interaksi hidrofobik pada kantong aktif protein yang berkontribusi terhadap stabilitas kompleks ligan–protein, meskipun kekuatan interaksinya tidak sekuat curcumin dan DMC.



Gambar 7. Visualisasi interaksi 2D dan 3D ligan ricinoleic acid dengan protein Human Rhinovirus 2R06

Gambar 7 menunjukkan visualisasi interaksi ricinoleic acid dengan protein target. Ligan terlihat berada pada binding pocket dengan nilai binding affinity yang sangat rendah (lebih negatif), meskipun tidak ditemukan ikatan hidrogen spesifik. Hal ini menunjukkan bahwa mekanisme pengikatan kemungkinan didominasi oleh interaksi hidrofobik dan van der Waals.



Gambar 8. Visualisasi interaksi 2D dan 3D ligan vanilin dengan protein Human Rhinovirus 2R06

Gambar 8 memperlihatkan interaksi antara vanilin dan protein Human Rhinovirus 2R06. Jumlah interaksi yang terbentuk relatif sedikit sehingga menunjukkan kestabilan kompleks yang lebih rendah dibandingkan ligan lainnya. Hasil ini sejalan dengan nilai binding affinity yang menunjukkan potensi inhibisi yang lebih lemah.

PEMBAHASAN

Hasil penelitian menunjukkan bahwa beberapa senyawa alami memiliki afinitas ikatan yang kuat terhadap protein Rhinovirus 2R06. Nilai *S score* yang semakin negatif menunjukkan interaksi ligan-protein yang semakin stabil, sedangkan nilai RMSD di bawah 3 Å mengindikasikan konformasi docking yang baik dan dapat diterima.

Curcumin dan Demethoxycurcumin (DMC) menjadi senyawa yang paling potensial karena memiliki kombinasi nilai *S score* negatif dan RMSD rendah. Curcumin membentuk ikatan hidrogen dengan residu Leu106 dan Val188, sedangkan DMC berinteraksi dengan Leu106 dan Tyr152. Ikatan hidrogen diketahui berperan penting dalam meningkatkan kestabilan kompleks ligan-protein sehingga dapat memperkuat aktivitas inhibisi terhadap protein target(Swandiny et al., 2023).

Ricinoleic acid menunjukkan nilai *binding affinity* terbaik berdasarkan *S score*, namun tidak ditemukan interaksi spesifik pada residu asam amino. Hal ini menunjukkan bahwa meskipun afinitas energi cukup tinggi, mekanisme pengikatan senyawa tersebut masih perlu dikaji lebih lanjut melalui simulasi dinamika molekuler atau uji biologis lanjutan.

Asiaticoside dan Madecassoside menunjukkan dominasi interaksi hidrofobik dengan beberapa residu asam amino. Interaksi hidrofobik diketahui mampu membantu stabilisasi kompleks ligan-protein, walaupun umumnya tidak sekuat ikatan hidrogen. Asiaticoside, misalnya, berinteraksi dengan residu Leu193, Val191, dan Pro155 sehingga menunjukkan potensi sebagai kandidat inhibitor protein Rhinovirus 2R06.

Sebaliknya, asam sinamat dan vanilin menunjukkan nilai *S score* yang relatif lebih tinggi sehingga afinitas ikatannya lebih lemah dibandingkan ligan lainnya. Nilai RMSD yang lebih tinggi juga menunjukkan kestabilan konformasi docking yang kurang optimal.

Visualisasi interaksi 2D dan 3D menggunakan Discovery Studio memperlihatkan bahwa residu Leu106, Val188, Tyr152, dan Met221 merupakan residu penting pada sisi aktif protein target. Keberadaan interaksi pada residu-residu tersebut mendukung kemungkinan aktivitas antivirus dari senyawa alami yang berasal dari tanaman obat Indonesia.

Hasil penelitian ini sejalan dengan penelitian sebelumnya yang menyatakan bahwa pendekatan *molecular docking* efektif digunakan dalam identifikasi kandidat obat berbasis bahan alam(Ferreira et al., 2015; Meng et al., n.d.). Oleh karena itu, Curcumin,

Demethoxycurcumin, dan Ricinoleic acid berpotensi dikembangkan lebih lanjut sebagai kandidat antivirus alami terhadap Rhinovirus 2R06 melalui pengujian *in vitro* dan *in vivo*.

KESIMPULAN

Hasil penelitian menunjukkan bahwa **curcumin, demethoxycurcumin (DMC), dan ricinoleic acid** memiliki potensi kuat sebagai kandidat antivirus terhadap Human Rhinovirus 2R06 berdasarkan nilai binding affinity yang tinggi serta kestabilan interaksi pada residu penting protein target. Penelitian ini memberikan kontribusi penting berupa eksplorasi awal kandidat antivirus berbasis tanaman obat tradisional Indonesia menggunakan pendekatan in silico. Temuan ini memperkaya literatur ilmiah terkait pemanfaatan senyawa fitokimia lokal sebagai sumber pengembangan obat alami untuk infeksi saluran pernapasan, sekaligus menunjukkan potensi besar biodiversitas Indonesia dalam bidang farmasi dan bioteknologi.

Ke depan, penelitian lanjutan perlu dilakukan melalui simulasi dinamika molekuler untuk menguji kestabilan kompleks ligan–protein dalam kondisi biologis yang lebih realistis. Selain itu, pengujian in vitro dan in vivo diperlukan untuk memastikan efektivitas, keamanan, serta toksisitas senyawa kandidat, disertai optimasi struktur dan pengembangan formulasi obat berbasis bahan alam sebagai langkah menuju aplikasi klinis terapi flu biasa.

DAFTAR PUSTAKA

Ahmad, N., Mishra, A., Ahsan, F., Mahmood, T., Hasan, N., & Khan, Z. (2016). *Ricinus communis*: Pharmacological actions and marketed medicinal products. *World Journal of Pharmaceutical and Life Sciences, 2*(6), 179–188. https://www.wjpls.org/home/article_abstract/295

Alherbawi, M., McKay, G., Mackey, H. R., & Al-Ansari, T. (2021). *Jatropha curcas* for jet biofuel production: Current status and future prospects. *Renewable and Sustainable Energy Reviews, 135*, Article 110396. https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.110396

Arden, K. E., Faux, C. E., O'Neill, N. T., McErlean, P., Nitsche, A., Lambert, S. B., Nissen, M. D., Sloots, T. P., & Mackay, I. M. (2010). Molecular characterization and distinguishing features of a novel human rhinovirus (HRV) C, HRVC-QCE, detected in children with fever, cough and wheeze during 2003. *Journal of Clinical Virology, 47*(3), 219–223. https://doi.org/10.1016/j.jcv.2010.01.001

Badger, J., Minor, I., Oliveira, M. A., Smith, T. J., & Rossmann, M. G. (1989). Structural analysis of antiviral agents that interact with the capsid of human rhinoviruses. *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics, 6*(1), 1–19. https://doi.org/10.1002/prot.340060102

Bochkov, Y. A., Palmenberg, A. C., Lee, W. M., Rathe, J. A., Amineva, S. P., Sun, X., Pasic, T. R., Jarjour, N. N., Liggett, S. B., & Gern, J. E. (2011). Molecular modeling, organ culture and reverse genetics for a newly identified human rhinovirus C. *Nature Medicine, 17*(5), 627–632. https://doi.org/10.1038/nm.2358

Chen, Z., Ma, Y., Guo, Z., Song, D., Chen, Z., & Sun, M. (2022). Ubiquitin-specific protease 1 acts as an oncogene and promotes lenvatinib efficacy in hepatocellular carcinoma by stabilizing c-kit. *Annals of Hepatology, 27*(2), Article 100669. https://doi.org/10.1016/j.aohep.2022.100669

Cicih, A., Aligita, W., & Susilawati, E. (2022). A review: The pharmacokinetics and pharmacodynamics of metformin-herb interactions. *Jurnal Ilmiah Farmasi (Scientific Journal of Pharmacy), 18*(1), 13–25. https://doi.org/10.20885/jif.vol18.iss1.art2

Coultas, J. A., Cafferkey, J., Mallia, P., & Johnston, S. L. (2021). Experimental antiviral therapeutic studies for human rhinovirus infections. *Journal of Experimental Pharmacology, 13*, 645–659. https://doi.org/10.2147/JEP.S255211

Djeddi, S., Fernandez-Salinas, D., Huang, G. X., Aguiar, V. R. C., Mohanty, C., Kendziorski, C., Gazal, S., Boyce, J. A., Ober, C., Gern, J. E., Barrett, N. A., & Gutierrez-Arcelus, M. (2024). Rhinovirus infection of airway epithelial cells uncovers the non-ciliated subset as a likely driver of genetic risk to childhood-onset asthma. *Cell Genomics, 4*(9), Article 100636. https://doi.org/10.1016/j.xgen.2024.100636

Ferreira, L. G., dos Santos, R. N., Oliva, G., & Andricopulo, A. D. (2015). Molecular docking and structure-based drug design strategies. *Molecules, 20*(7), 13384–13421. https://doi.org/10.3390/molecules200713384

Fuloria, S., Mehta, J., Chandel, A., Sekar, M., Rani, N. N. I. M., Begum, M. Y., Subramaniyan, V., Chidambaram, K., Thangavelu, L., Nordin, R., Wu, Y. S., Sathasivam, K. V., Lum, P. T., Meenakshi, D. U., Kumarasamy, V., Azad, A. K., & Fuloria, N. K. (2022). A comprehensive review on the therapeutic potential of *Curcuma longa* Linn. in relation to its major active constituent curcumin. *Frontiers in Pharmacology, 13*, Article 820806. https://doi.org/10.3389/fphar.2022.820806

Li, Y., Ryan, J., Xu, F., & Vostal, J. G. (2019). Macrophage depletion mitigates platelet aggregate formation in splenic marginal zone and alleviates LPS-associated thrombocytopenia in rats. *Frontiers in Medicine, 6*, Article 300. https://doi.org/10.3389/fmed.2019.00300

Meng, X.-Y., Zhang, H.-X., Mezei, M., & Cui, M. (2011). Molecular docking: A powerful approach for structure-based drug discovery. *Current Computer-Aided Drug Design, 7*(2), 146–157. https://doi.org/10.2174/157340911795677602

Palmenberg, A. C., Spiro, D., Kuzmickas, R., Wang, S., Djikeng, A., Rathe, J. A., Fraser-Liggett, C. M., & Liggett, S. B. (2009). Sequencing and analyses of all known human rhinovirus genomes reveal structure and evolution. *Science, 324*(5923), 55–59. https://doi.org/10.1126/science.1165557

Reddy, B. V., & Gupta, A. (2020). Importance of effective communication during COVID-19 infodemic. *Journal of Family Medicine and Primary Care, 9*(8), 3793–3796. https://doi.org/10.4103/jfmpc.jfmpc_719_20

Royston, L., & Tapparel, C. (2016). Rhinoviruses and respiratory enteroviruses: Not as simple as ABC. *Viruses, 8*(1), Article 16. https://doi.org/10.3390/v8010016

Salehi, B., Ata, A., Kumar, N. V. A., Sharopov, F., Ramírez-Alarcón, K., Ruiz-Ortega, A., Ayatollahi, S. A., Fokou, P. V. T., Kobarfard, F., Zakaria, Z. A., Iriti, M., Taheri, Y., Martorell, M., Sureda, A., Setzer, W. N., Durazzo, A., Lucarini, M., Santini, A., Capasso, R., … Sharifi-Rad, J. (2019). Antidiabetic potential of medicinal plants and their active components. *Biomolecules, 9*(10), Article 551. https://doi.org/10.3390/biom9100551

Sun, B., Wu, L., Wu, Y., Zhang, C., Qin, L., Hayashi, M., Kudo, M., Gao, M., & Liu, T. (2020). Therapeutic potential of *Centella asiatica* and its triterpenes: A review. *Frontiers in Pharmacology, 11*, Article 568032. https://doi.org/10.3389/fphar.2020.568032

Swandiny, G. F., Primahana, G., Prastya, M. E., Ariani, N., Susanti, D., Hanafi, M., & Abdillah, S. (2023). An ethnopharmacology study of Indonesian medicinal plants in Gunung Sari village as dipeptidyl peptidase-IV inhibitor. *Pharmacia, 70*(2), 365–373. https://doi.org/10.3897/pharmacia.70.e104437

Xia, D. D., Han, X. Y., Zhang, Y., & Zhang, N. (2023). Chemical constituents and their biological activities from genus *Styrax*. *Pharmaceuticals, 16*(7), Article 1043. https://doi.org/10.3390/ph16071043