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.v6i3.10084

ANALISIS DOCKING MOLEKULER SENYAWA FITOKIMIA INDONESIA TERHADAP PROTEIN RHINOVIRUS 2R06

Molecular Docking Analysis of Indonesian Phytochemical Compounds against Rhinovirus 2R06 Protein

Kinanti Ratu Saylendra & Deski Beri
Universitas Negeri Padang
kinantisylndr12@gmail.com

Article Info:

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

Abstract

Human Rhinovirus 14 (HRV14) is one of the main causes of upper respiratory tract infections and to date has no specific antiviral therapy. This study aims to analyze the potential of phytochemical compounds from Indonesian traditional plants against the VP1 protein of Rhinovirus 2R06 using an *in silico* molecular docking method. This study used a quantitative *in silico*-based approach with MOE 2022 software to evaluate the binding affinity and stability of ligand interactions with the viral receptor. The results showed that tannin, cowanol, and andrographolide had the best binding affinities, with S-scores of -11.6692, -10.2501, and -7.8695 kcal/mol, respectively. Low RMSD values indicated good stability of the ligand-receptor complexes, while the interactions formed were dominated by hydrogen bonds and electrostatic interactions with several important amino acid residues in the VP1 protein. Thus, phytochemical compounds from Indonesian traditional plants have the potential to be developed as natural antiviral candidates against Rhinovirus infection. This study provides an initial scientific basis for the development of plant-based therapeutic candidates, although further experimental validation is still required to confirm their effectiveness and biological mechanisms.

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

Keywords: Molecular Docking; Rhinovirus; Phytochemicals; Indonesian Traditional Plants; Ligand-Protein Interaction

Abstrak: *Human Rhinovirus* 14 (HRV14) merupakan salah satu penyebab utama infeksi saluran pernapasan atas yang hingga kini belum memiliki terapi antivirus spesifik. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis potensi senyawa fitokimia dari tanaman tradisional Indonesia terhadap protein VP1 Rhinovirus 2R06 menggunakan metode penambatan molekuler secara *in silico*. Penelitian ini menggunakan pendekatan kuantitatif berbasis *in silico* dengan perangkat lunak MOE 2022 untuk mengevaluasi afinitas ikatan dan stabilitas interaksi ligan terhadap reseptor virus. Hasil penelitian menunjukkan bahwa tanin, cowanol, dan andrographolide memiliki afinitas pengikatan terbaik dengan nilai skor S masing-masing sebesar -11,6692; -10,2501; dan -7,8695 kcal/mol. Nilai RMSD yang rendah menunjukkan stabilitas kompleks ligan-reseptor yang baik, sedangkan interaksi yang terbentuk didominasi oleh ikatan hidrogen dan interaksi elektrostatik dengan beberapa residu asam amino penting pada protein VP1. Dengan demikian, senyawa fitokimia dari tanaman tradisional Indonesia berpotensi dikembangkan sebagai kandidat antivirus alami terhadap infeksi Rhinovirus. Penelitian ini memberikan dasar ilmiah awal bagi pengembangan kandidat terapeutik berbasis senyawa nabati, meskipun validasi eksperimental lebih lanjut tetap diperlukan untuk memastikan efektivitas dan mekanisme biologisnya.

Kata Kunci: Penambatan Molekuler; Rhinovirus; Fitokimia; Tanaman Tradisional Indonesia; Interaksi Ligan-Protein

PENDAHULUAN

Rhinovirus merupakan virus dari famili *Picornaviridae*. Nama "*rhino*" berasal dari bahasa Yunani yang berarti "hidung" karena virus ini umumnya menginfeksi saluran hidung (Gil-Cantero et al., 2024). Rhinovirus bereplikasi optimal pada suhu rendah, seperti suhu di rongga hidung, sehingga mudah berkembang di saluran pernapasan atas. Virus ini memiliki ratusan tipe berbeda dengan karakteristik masing-masing. Rhinovirus 2R06 merupakan salah satu tipe rhinovirus yang sering menyebabkan pilek dan infeksi saluran pernapasan atas pada manusia (Djeddi et al., 2024).

Rhinovirus 2R06 adalah salah satu dari banyak jenis rhinovirus yang menjadi penyebab utama pilek (Esneau et al., 2025). Asal-usul spesifik dari *strain* 2R06 ini sulit dilacak dengan pasti, karena rhinovirus terus bermutasi dan berevolusi (Zhang et al., 2022). Seperti rhinovirus lainnya, virus ini diyakini berasal dari hewan dan kemudian beradaptasi untuk menginfeksi manusia. Sayangnya, hingga saat ini belum ada obat khusus yang dapat menyembuhkan pilek yang disebabkan oleh rhinovirus, termasuk *strain* 2R06 (Coultas et al., 2021). Virus ini umumnya bersifat *self-limiting*, artinya tubuh akan melawan dan sembuh dengan sendirinya dalam beberapa hari hingga seminggu (Royston & Tapparel, 2016).

Tanaman tradisional telah lama dimanfaatkan sebagai sumber obat alami karena mengandung berbagai senyawa aktif yang bermanfaat bagi kesehatan (Atampugbire et al., 2024). Penelitian ini menggunakan empat tanaman obat tradisional Indonesia, yaitu andaliman (*Zanthoxylum acanthopodium*), yang banyak digunakan dalam pengobatan tradisional dan masakan di Sumatera Utara (Adrian et al., 2023); gambir (*Uncaria gambir Roxb*), yang memiliki potensi farmakologis dan etnomedis yang luas (Chihomvu et al., 2024); asam kandis (*Garcinia cowa*), yang bagian kulit kayu, buah, dan akarnya digunakan untuk pengobatan tradisional (Shahid et al., 2022); serta empedu tanah (*Andrographis paniculata*), tanaman herbal yang umum digunakan dalam pengobatan tradisional di berbagai negara Asia (Sadhana et al., 2020).

Analisis *in silico* digunakan untuk memprediksi interaksi antara protein dan senyawa kimia, termasuk senyawa aktif dari tumbuhan (Shaker et al., 2021). Penelitian ini mengkaji potensi senyawa dari andaliman, gambir, asam kandis, dan empedu tanah dalam mengikat protein Rhinovirus 2R06. Andaliman mengandung alkaloid dan terpenoid yang memiliki aktivitas antivirus dan antiinflamasi (Kolesnikova et al., 2021). Gambir mengandung tanin dengan sifat antimikroba dan kemampuan menghambat replikasi virus. Asam kandis mengandung asam organik, seperti asam sitrat dan asam malat, yang dapat memengaruhi struktur protein, serta vitamin C yang bersifat antioksidan (Ma & Yao, 2020). Empedu tanah mengandung alkaloid dan flavonoid yang berpotensi sebagai antivirus dan antiinflamasi (Kolesnikova et al., 2021).

Protein 2R06 berperan dalam berbagai fungsi biologis dan interaksi molekuler. Metode *in silico* digunakan untuk menganalisis interaksi senyawa bioaktif dari andaliman, asam kandis, empedu tanah, dan gambir terhadap protein 2R06 melalui simulasi docking. Analisis ini membantu mengidentifikasi senyawa dengan afinitas tinggi yang berpotensi sebagai agen terapeutik. Selain itu, prediksi aktivitas biologis dilakukan untuk menilai potensi antivirus dan antiinflamasi senyawa tumbuhan. Pemodelan struktur 3D protein juga digunakan untuk mengidentifikasi situs aktif dan lokasi pengikatan ligan. Senyawa bioaktif kemudian disaring secara virtual untuk menentukan kandidat paling efektif terhadap protein 2R06 (Djeddi et al., 2024; Pinzi & Rastelli, 2019).

Penelitian mengenai aktivitas antivirus tanaman tradisional Indonesia terhadap Human Rhinovirus 14 (HRV14) masih terbatas, khususnya pada protein VP1 menggunakan pendekatan molecular docking. Sebagian besar penelitian sebelumnya lebih berfokus pada

aktivitas farmakologis umum senyawa fitokimia tanpa mengevaluasi afinitas pengikatan terhadap reseptor virus secara spesifik (Musarra-Pizzo et al., 2021). Selain itu, studi *in silico* terkait interaksi senyawa alami dengan protein VP1 Rhinovirus masih terus berkembang dan menunjukkan potensi senyawa fitokimia sebagai kandidat antivirus baru (Singh et al., 2024).

Penelitian ini bertujuan untuk mengeksplorasi potensi senyawa bioaktif dalam tanaman andaliman, gambir, asam kandis, dan tanaman empedu tanah sebagai kandidat penghambat protein rhinovirus. Melalui pendekatan molekuler docking, diharapkan dapat ditemukan senyawa yang berpotensi menghambat replikasi virus penyebab pilek (Shaker et al., 2021). Hasil penelitian ini tidak hanya berpotensi berkontribusi pada pengembangan obat antivirus alami, tetapi juga membuka peluang untuk pemanfaatan lebih lanjut kekayaan hayati Indonesia (Jamiu et al., 2021).

METODE

1. Spesifikasi Laptop dan Perangkat Lunak yang Digunakan

Perangkat yang digunakan dalam penelitian ini adalah laptop Lenovo Ideapad 3 dengan nomor model LAPTOP-B7186JAD. Perangkat ini ditenagai oleh prosesor AMD Ryzen 3 5300U dengan kartu grafis terintegrasi Radeon, yang memiliki kecepatan hingga 2,60 GHz. Kapasitas RAM pada perangkat ini adalah 8 GB, namun kapasitas yang dapat digunakan saat ini sekitar 5,85 GB. Sistem operasi yang digunakan adalah sistem 64-bit pada prosesor x64.

Perangkat lunak yang digunakan dalam penelitian ini adalah MOE 2022, Discovery Studio 2024, PyMol Education 1.3, Protein Data Bank (PDB), PDBSum, dan PubChem.

2. Preparasi Protein

Reseptor protein bakteri yang dipilih adalah 2R06; reseptor protein tersebut disiapkan menggunakan perangkat lunak MOE 2022, di mana reseptor protein tersebut diminiaturkan dengan metode QuickPrep dengan konvergensi energi ditetapkan pada gradien Root Mean Square (RMS) sebesar 0,01 kcal/mol/Å^2. Metode Protonate3D diatur secara default untuk secara otomatis memprediksi koordinat hidrogen pada struktur 3D.

3. Preparasi Ligan

Simulasi docking molekuler menggunakan ligan limonene, linalool, zanthoxylin, sabinene, β-pinene, katekin, epikatekin, tanin, proantosianidin, garcinol, cowanol, dan

andrografolid dari andaliman, gambir, asam kandis, dan empedu tanah. Struktur ligan diperoleh dari PubChem dan diproses menggunakan MOE 2022. Preparasi ligan dilakukan dengan pembersihan struktur, penambahan hidrogen eksplisit, serta minimisasi energi menggunakan gradien RMS 0,01 kcal/mol/Å².

Situs pengikatan yang diidentifikasi menggunakan MOE 2022 dan dikonfirmasi melalui literatur serta PDBsum dianalisis dengan PyMOL Educational 1.3 untuk memverifikasi lokasi celah pengikatan reseptor. Residu asam amino pada situs aktif meliputi Tyr197, Leu106, Tyr128, Met221, Met224, Tyr152, Pro174, dan Ala24. Proses docking protein–ligan dilakukan menggunakan metode induced fit pada MOE dengan menghasilkan 100 pose, kemudian dipilih konformasi terbaik.

4. Ikatan Ligand dengan Protein

Hasil docking dianalisis berdasarkan nilai RMSD dan S score. Nilai S score menunjukkan kekuatan afinitas ikatan ligan–reseptor, dimana nilai yang lebih negatif menandakan ikatan lebih stabil. Nilai RMSD digunakan untuk menilai kesesuaian konformasi docking, dan hasil dengan RMSD < 3 Å dianggap valid. Analisis interaksi ikatan, seperti ikatan hidrogen, karbon-hidrogen, dan van der Waals, dilakukan menggunakan Discovery Studio 2024 Client berdasarkan diagram 2D.

Analisis dilakukan dengan membandingkan seluruh ligan untuk menentukan kandidat terbaik. Ligan dengan nilai S score terendah dan interaksi paling stabil (seperti tannin dan cowanol dalam hasil penelitian) diidentifikasi sebagai kandidat antiviral potensial. Penelitian ini dilakukan pada bulan Agustus hingga Desember 2024.

HASIL

Hasil penelitian ini mengevaluasi potensi 12 tanaman tradisional sebagai kandidat antivirus terhadap Rhinovirus 2R06, penyebab utama infeksi saluran pernapasan akut. Analisis dilakukan menggunakan molecular docking pada MOE 2022 untuk memprediksi interaksi antara senyawa aktif tanaman dan protein reseptor 2R06.

Tabel 1 menunjukkan hasil molecular docking antara 12 ligan fitokimia dan protein VP1 Rhinovirus 2R06. Parameter yang dianalisis meliputi nilai S score, RMSD, residu asam amino, jenis interaksi, dan jarak ikatan. Nilai S score digunakan untuk menilai kekuatan

afinitas ikatan ligan terhadap reseptor, dimana nilai yang semakin negatif menunjukkan interaksi yang semakin stabil.

Tabel 1. Hasil docking Rhinovirus 2R06

Ligand	S (kcal/mol)	RMSD (Å)	Amino Acid Interaction	Type of Interaction	Bond Distance (Å)
Limonene	-5.2192	1.5771	Leu150, Val123, Ile89	Hydrogen Bond;Electrostatic	2.8674
Linalool	-5.7778	0,8343	-	Hydrogen Bond	1.86935
Zanthoxylin	-7.3729	1.7478	Lys215	Hydrogen Bond	1.99381
Sabinene	-5.1693	1.9158	Leu150	Hydrogen Bond	2.13877
β-Pinene	-5.3094	0.8812	Leu150, Val123	Hydrogen Bond	2.6825
Catechin	-7.1201	1.6403	Thr120, Tyr121, Val122	Hydrogen Bond	2.3841 3,31
Epicatechin	-7.1100	1.7671	Val122, Tyr121, Thr120	Hydrogen Bond	1.48068
Tannin	-11.6692	3.5063	Ser45, Thr47,	Hydrogen Bond;Electrostatic	3.08291
Proanthocyanidins	-7.0408	2.0165	Ser45,	Hydrogen Bond	2.06092
Garcinol	-6.7677	1.3656	-	Hydrogen Bond	2.50156
Cowanol	-10.2501	2.3109	-	Hydrogen Bond	2.77494
Andrographolide	-7.8695	1.5721	Arg220	Hydrogen Bond	2.97757

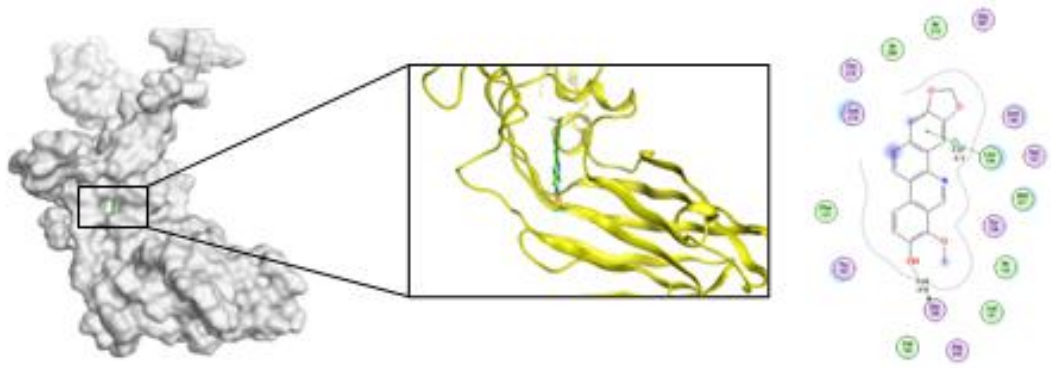
Tanda (-) menunjukkan tidak adanya interaksi residu yang terdeteksi.

Berdasarkan data pada Tabel 1, senyawa dengan afinitas pengikatan terbaik adalah tanin, cowanol, dan andrographolide. Tanin memperoleh nilai skor S tertinggi sebesar -11,6692 kcal/mol dengan interaksi pada residu Ser45, Thr47, dan Lys215. Cowanol menunjukkan skor S sebesar -10,2501 kcal/mol, sedangkan andrographolide memiliki skor S sebesar -7,8695 kcal/mol dan berinteraksi dengan Arg220.

Sebagian besar ligan menunjukkan nilai RMSD di bawah 3 Å yang menandakan kestabilan kompleks ligan–reseptor yang baik. Namun, tanin memiliki nilai RMSD sedikit di atas 3 Å yang mengindikasikan kemungkinan fleksibilitas konformasi yang lebih tinggi.

1. Zanthoxylin

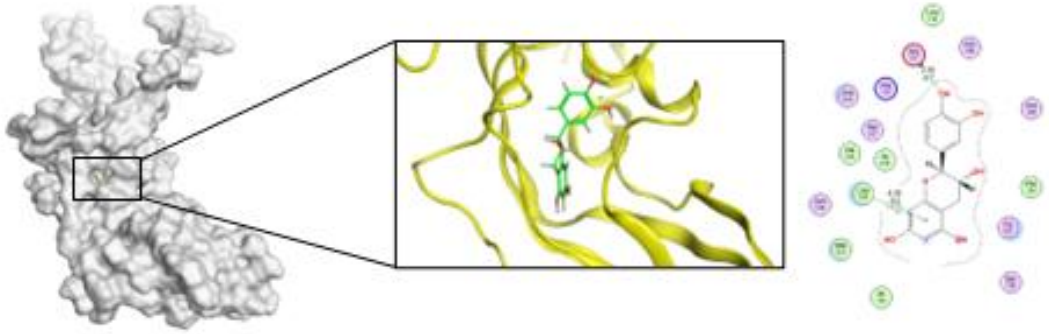
Gambar 1 menunjukkan visualisasi interaksi 2D dan 3D antara ligan zanthoxylin dengan protein VP1 Rhinovirus 2R06. Interaksi utama yang terbentuk adalah ikatan hidrogen dengan residu Lys215 pada jarak ikatan 1,99 Å. Nilai S score sebesar -7,3729 kcal/mol menunjukkan bahwa zanthoxylin memiliki afinitas pengikatan yang cukup baik terhadap reseptor protein.



Gambar 1. Interaksi Zanthoxylin dengan Protein VP1 HRV14

2. Catechin

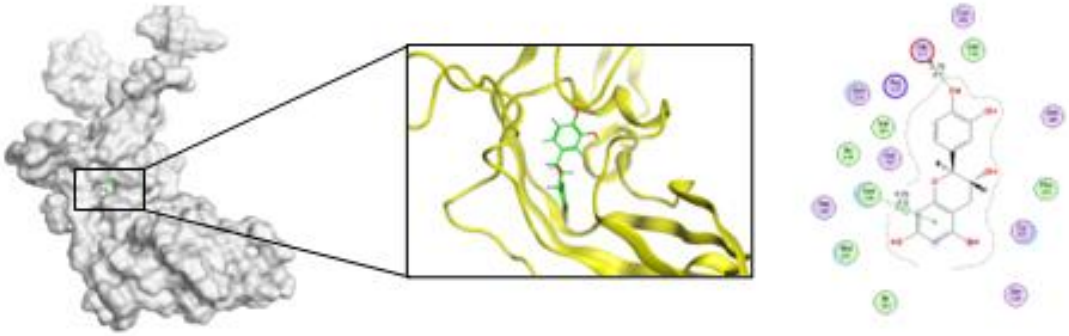
Gambar 2 memperlihatkan interaksi ligan catechin dengan protein VP1 HRV14 melalui ikatan hidrogen pada residu Thr120, Tyr121, dan Val122. Nilai RMSD sebesar 1,6403 Å menunjukkan stabilitas kompleks ligan–reseptor yang baik selama simulasi docking.



Gambar 2. Interaksi Catechin dengan Protein VP1 HRV14

3. Epicatechin

Gambar 3 menunjukkan interaksi epicatechin dengan residu Val122, Tyr121, dan Thr120 melalui ikatan hidrogen. Senyawa ini memiliki nilai S score sebesar -7,1100 kcal/mol yang menunjukkan potensi afinitas pengikatan terhadap protein VP1 HRV14.



Gambar 3. Interaksi Epicatechin dengan Protein VP1 HRV14

PEMBAHASAN

Penelitian ini mengevaluasi potensi 12 jenis tanaman tradisional sebagai obat melawan Rhinovirus 2R06, yang merupakan penyebab utama infeksi saluran pernapasan akut. Tanaman-tanaman ini, seperti andaliman, gambir, asam kandis, dan empedu tanah, telah digunakan dalam pengobatan tradisional dan telah menunjukkan potensi besar dalam memberikan manfaat kesehatan yang signifikan (Swandiny et al., 2023). Dengan menggunakan perangkat lunak MOE 2022, penelitian ini melakukan docking molekuler untuk memprediksi interaksi antara protein reseptor 2R06 dan ligan-ligan tersebut.

Hasil docking molekuler menunjukkan bahwa beberapa ligan dari tanaman tradisional Indonesia memiliki interaksi kuat dengan reseptor Rhinovirus 2R06 sehingga berpotensi sebagai agen antivirus. Tanin, cowanol, dan andrographolide menunjukkan hasil terbaik berdasarkan nilai S score yang menandakan afinitas pengikatan tinggi terhadap protein 2R06. Nilai S score dan RMSD digunakan untuk mengevaluasi kestabilan interaksi ligan–reseptor, dimana nilai S score yang lebih negatif menunjukkan afinitas pengikatan yang lebih kuat terhadap protein target.

Tanin memiliki afinitas tertinggi dengan nilai S score sebesar -11,6692 kcal/mol dan berinteraksi dengan residu asam amino Ser45, Thr47, dan Lys215 melalui ikatan hidrogen dan interaksi elektrostatik. Cowanol menunjukkan nilai S score sebesar -10,2501 kcal/mol dengan interaksi yang stabil terhadap reseptor. Andrographolide memiliki nilai S score sebesar -7,8695 kcal/mol dan berinteraksi dengan residu Arg220 melalui ikatan hidrogen. Hasil ini menunjukkan bahwa ketiga senyawa tersebut memiliki potensi sebagai kandidat antivirus alami terhadap Rhinovirus 2R06.

Nilai RMSD yang rendah (berkisar antara 0,83 hingga 3,5 Å) pada sebagian besar ligan semakin memperkuat keandalan interaksi-interaksi ini. Nilai RMSD yang rendah menunjukkan bahwa konformasi hasil docking sangat selaras dengan struktur referensi, yang menegaskan stabilitas kompleks-kompleks ini. Ikatan hidrogen dan interaksi elektrostatik, yang sangat penting dalam studi docking molekuler, juga menonjol pada ligan seperti katekin, zantoksilin, dan epikatekin, yang semakin memperkuat potensi sifat antivirusnya.

Selain ligan dengan afinitas terbaik, catechin, zanthoxylin, dan epicatechin juga menunjukkan interaksi yang baik dengan reseptor 2R06. Catechin memiliki skor S sebesar -7,1201 kcal/mol dan berinteraksi dengan residu Ser45 dan Thr47 melalui ikatan hidrogen, yang menunjukkan afinitas pengikatan sedang. Epicatechin dan zanthoxylin memiliki skor S

masing-masing sebesar -7,1100 dan -7,3729 kcal/mol dengan interaksi pada residu Asn78 dan Lys215. Meskipun afinitasnya lebih rendah dibandingkan tanin dan cowanol, senyawa-senyawa tersebut tetap berpotensi sebagai kandidat antivirus untuk penelitian lanjutan secara *in vitro* dan in vivo. Perbedaan afinitas pengikatan antar ligan menunjukkan keragaman profil kimia senyawa tumbuhan yang dapat dikembangkan untuk meningkatkan efektivitas terapi terhadap Rhinovirus 2R06 (Sitovs & Mohylyuk, 2024).

Interaksi ligan dengan reseptor didominasi oleh ikatan hidrogen dan interaksi elektrostatik yang berperan dalam menjaga stabilitas kompleks ligan–protein. Ikatan hidrogen membantu memperkuat afinitas pengikatan ligan terhadap residu asam amino pada protein VP1 Rhinovirus 2R06. Stabilitas interaksi ini menunjukkan bahwa senyawa fitokimia dari tanaman tradisional Indonesia memiliki potensi sebagai kandidat antivirus alami terhadap HRV14 (Pinzi & Rastelli, 2019; Shaker et al., 2021).

Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa tanin, cowanol, dan andrographolide memiliki afinitas pengikatan yang tinggi terhadap protein VP1 Rhinovirus 2R06. Temuan ini sejalan dengan penelitian Musarra-Pizzo et al. (2021) yang melaporkan bahwa senyawa fitokimia dari tanaman memiliki aktivitas antivirus melalui interaksi stabil dengan protein virus, terutama melalui ikatan hidrogen dan interaksi elektrostatik (Musarra-Pizzo et al., 2021). Penelitian Singh et al. (2024) juga menunjukkan bahwa senyawa alami dari tanaman obat memiliki potensi menghambat aktivitas Rhinovirus melalui pendekatan molecular docking pada protein VP1(Singh et al., 2024).

Secara keseluruhan, hasil docking menunjukkan bahwa tanin, cowanol, dan andrographolide memiliki potensi terbaik sebagai kandidat antivirus terhadap Rhinovirus 2R06. Ketiga senyawa tersebut menunjukkan afinitas pengikatan yang kuat dan interaksi stabil dengan protein reseptor sehingga berpotensi dikembangkan sebagai terapi antivirus alami. Namun, penelitian ini masih terbatas pada pendekatan *in silico* dan belum menggambarkan aktivitas biologis secara langsung. Oleh karena itu, diperlukan pengujian lanjutan secara *in vitro* dan *in vivo* untuk memastikan efektivitas serta keamanan senyawa.

KESIMPULAN

Berdasarkan hasil penelitian *in silico*, senyawa bioaktif dari tanaman tradisional Indonesia, yaitu andaliman, gambir, asam kandis, dan empedu tanah, berpotensi sebagai kandidat antivirus terhadap Rhinovirus 2R06. Hasil docking molekuler menunjukkan bahwa

tanin, cowanol, dan andrographolide memiliki afinitas pengikatan terbaik terhadap protein target berdasarkan nilai S score dan RMSD yang memenuhi kriteria validitas docking. Interaksi ligan–reseptor didominasi oleh ikatan hidrogen dan interaksi elektrostatik yang mendukung kestabilan kompleks protein. Penelitian ini memberikan informasi awal mengenai potensi senyawa fitokimia tanaman tradisional Indonesia sebagai kandidat antivirus alami terhadap HRV14 berbasis molecular docking.

Penelitian ini menunjukkan bahwa tanaman tradisional Indonesia berpotensi dikembangkan sebagai sumber senyawa antivirus alami. Namun, diperlukan penelitian lanjutan melalui uji *in vitro* dan *in vivo* untuk memastikan efektivitas, keamanan, serta mekanisme kerja senyawa terhadap Rhinovirus 2R06.

DAFTAR PUSTAKA

Adrian, Syahputra, R. A., Juwita, N. A., Astyka, R., & Lubis, M. F. (2023). Andaliman (*Zanthoxylum acanthopodium* DC.) a herbal medicine from North Sumatera, Indonesia: Phytochemical and pharmacological review. *Heliyon, 9*(5), Article e16159. https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e16159

Atampugbire, G., Adomako, E. E. A., & Quaye, O. (2024). Medicinal plants as effective antiviral agents and their potential benefits. *Natural Product Communications, 19*(9). https://doi.org/10.1177/1934578X241282923

Chihomvu, P., Ganesan, A., Gibbons, S., Woollard, K., & Hayes, M. A. (2024). Phytochemicals in drug discovery—A confluence of tradition and innovation. *International Journal of Molecular Sciences, 25*(16), Article 8792. https://doi.org/10.3390/ijms25168792

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). https://doi.org/10.1016/j.xgen.2024.100636

Esneau, C., Bryant, N. E., Johnston, S. L., & Bartlett, N. W. (2025). Opportunities for rhinovirus-targeted RNA therapeutics: A narrative review. *CMI Communications, 2*(3), Article 105081. https://doi.org/10.1016/j.cmicom.2025.105081

Gil-Cantero, D., Mata, C. P., Valiente, L., Rodríguez-Huete, A., Valbuena, A., Twarock, R., Stockley, P. G., Mateu, M. G., & Castón, J. R. (2024). Cryo-EM of human rhinovirus reveals capsid-RNA duplex interactions that provide insights into virus assembly and genome uncoating. *Communications Biology, 7*(1). https://doi.org/10.1038/s42003-024-07213-2

Jamiu, A. T., Pohl, C. H., Bello, S., Adedoja, T., & Sabiu, S. (2021). A review on molecular docking analysis of phytocompounds against SARS-CoV-2 druggable targets. *All Life, 14*(1), 1100–1128. https://doi.org/10.1080/26895293.2021.2013327

Kolesnikova, S. A., Lyakhova, E. G., Kozhushnaya, A. B., Kalinovsky, A. I., Berdyshev, D. V., Popov, R. S., & Stonik, V. A. (2021). New isomalabaricane-derived metabolites from a *Stelletta* sp. marine sponge. *Molecules, 26*(3), Article 678. https://doi.org/10.3390/molecules26030678

Ma, L., & Yao, L. (2020). Antiviral effects of plant-derived essential oils and their components: An updated review. *Molecules, 25*(11), Article 2627. https://doi.org/10.3390/molecules25112627

Musarra-Pizzo, M., Pennisi, R., Ben-Amor, I., Mandalari, G., & Sciortino, M. T. (2021). Antiviral activity exerted by natural products against human viruses. *Viruses, 13*(5), Article 828. https://doi.org/10.3390/v13050828

Pinzi, L., & Rastelli, G. (2019). Molecular docking: Shifting paradigms in drug discovery. *International Journal of Molecular Sciences, 20*(18), Article 4331. https://doi.org/10.3390/ijms20184331

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

Sadhana, H. M., Joghee, S., & Hamsalakshmi. (2020). *Andrographis paniculata*—A review. *International Journal of Research in Pharmaceutical Sciences, 11*(4), 5395–5400. https://doi.org/10.26452/ijrps.v11i4.3162

Shahid, M., Law, D., Azfaralariff, A., Mackeen, M. M., Chong, T. F., & Fazry, S. (2022). Phytochemicals and biological activities of *Garcinia atroviridis*: A critical review. *Toxics, 10*(11), Article 656. https://doi.org/10.3390/toxics10110656

Shaker, B., Ahmad, S., Lee, J., Jung, C., & Na, D. (2021). In silico methods and tools for drug discovery. *Computers in Biology and Medicine, 137*, Article 104851. https://doi.org/10.1016/j.compbiomed.2021.104851

Singh, D., Mittal, N., Mittal, P., Tiwari, N., Khan, S. U. D., Ali, M. A. M., Chaudhary, A. A., & Siddiqui, M. H. (2024). In silico molecular screening of bioactive natural compounds of rosemary essential oil and extracts for pharmacological potentials against rhinoviruses. *Scientific Reports, 14*(1). https://doi.org/10.1038/s41598-024-68450-3

Sitovs, A., & Mohylyuk, V. (2024). Ex vivo permeability study of poorly soluble drugs across gastrointestinal membranes: Acceptor compartment media composition. *Drug Discovery Today, 29*(12), Article 104214. https://doi.org/10.1016/j.drudis.2024.104214

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

Zhang, Z., Tan, L., Tan, M., Zhang, X., He, W., Li, M., He, J., Pan, Y., Xu, B., Bin, S., Gan, Z., Yan, L., Sun, Y., Jiang, H., Sun, Q., & Zhang, Z. (2022). Molecular characterization of the viral structural genes of human rhinovirus A11 from children hospitalized with lower respiratory tract infection in Kunming. *International Journal of Infectious Diseases, 117*, 274–283. https://doi.org/10.1016/j.ijid.2022.01.066