

Penambatan molekuler beberapa senyawa xanton dari tanaman garcinia mangostana

Farida Nurfitriyana, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20181177&lokasi=lokal>

Abstrak

Human Immunodeficiency Virus tipe 1 (HIV-1) merupakan retrovirus penyebab penyakit mematikan AIDS (Acquired Immunodeficiency Syndrome). Virusnya yang cepat bermutasi menyebabkan belum adanya obat yang dapat menyembuhkan penyakit ini secara total. Salah satu target enzim yang dapat diinhibisi untuk menghambat replikasi virus ini adalah protease HIV-1. Inhibisi pada enzim ini menyebabkan hambatan pemotongan protein pada tahap pematangan virus. Beberapa senyawa xanton dari tanaman *Garcinia mangostana* Linn. yakni 945-, 946-, dan -mangostin menunjukkan aktivitas inhibisi pada enzim ini. Strukturnya yang berupa nonpeptida memungkinkan adanya mekanisme berbeda dari inhibitor lain. Tujuan penelitian ini adalah untuk mengamati model pengikatan dari analog mangostin tersebut. Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah penambatan molekuler secara *in silico*. Hasil menunjukkan bahwa terdapat dua model pengikatan dengan afinitas yang lebih tinggi pada sisi aktif kantung hidrofobik (916;G AutoDock 4 = (-9,64)-(-9,89) kkal/mol; 916;G AutoDock Vina = (-8,7)-(-9,4) kkal/mol) dan pada sisi permukaan luar yang masih menunjukkan afinitas ikatan yang baik (916;G AutoDock 4 = (-5,85)-(-6,06) kkal/mol; 916;G AutoDock Vina = (-5,3)-(-5,9) kkal/mol).

<hr>

Human Immunodeficiency Virus type 1 (HIV-1) is a retroviral virus that cause deadly disease, AIDS (Acquired Immunodeficiency Syndrome). The virus that mutates so fast cause no drugs available to cure this disease totally yet. One of enzyme target that can be inhibited to block the replication of this virus is HIV-1 protease. Inhibition to this enzyme cause the blocking of protein cleavage in virus maturation process. Several xanthon compound from *Garcinia mangostana* Linn., 945-, 946-, dan -mangostin, has shown inhibition activity to this enzyme. The structure, which is non-peptide based, gives possibility to different mechanism than other inhibitor. This research's aim is to search the binding modes of mangostin analogues. The method used in this research is *in silico* molecular docking. The result shows that there are two binding modes with higher affinity in hydrophobic pocket active site (916;G AutoDock 4 = (-9,64)-(-9,89) kcal/mol; 916;G AutoDock Vina = (-8,7)-(-9,4) kcal/mol) and molecular surface site which still shows good affinity (916;G AutoDock 4 = (-5,85)-(-6,06) kcal/mol; 916;G AutoDock Vina = (-5,3)-(-5,9) kcal/mol).