

Perancangan peptida siklis sebagai inhibitor potensial untuk enzim NS3-NS2B protease virus dengue secara in silico melalui molecular docking

Samira, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20181856&lokasi=lokal>

Abstrak

Demam berdarah, penyakit yang disebabkan oleh infeksi virus dengue, telah menjadi masalah kesehatan yang utama di negara tropis dan subtropis. Hingga saat ini belum tersedia vaksin atau pengobatan yang efektif. Pada penelitian ini dilakukan studi in silico untuk merancang ligan peptida siklis yang dapat berperan sebagai inhibitor potensial untuk enzim NS3-NS2B protease virus dengue sehingga diharapkan dapat menghambat replikasi virus tersebut dalam tubuh. Struktur tiga dimensi enzim diperoleh dari Protein Data Bank. Analisis terhadap binding site dan sekuens asam amino substrat pada sisi pemotongan enzim menghasilkan tujuh buah rancangan ligan siklopentapeptida yang disiklisasi melalui ikatan disulfida sistein. Lalu dimodelkan ke dalam bentuk tiga dimensi.

Optimasi geometri dan minimasi energi dilakukan untuk menghilangkan bad contact. Analisis kekuatan afinitas ligan terhadap enzim melalui molecular docking menunjukkan bahwa ketujuh ligan tersebut memiliki afinitas dan potensi inhibisi yang lebih baik dari ligan standar Bz-Nle-K-R-R-H. Hasil terbaik ditunjukkan oleh ligan KRK dengan energi ikatan $-8,39$ kkal/mol dan K_i $0,707$ μ M. Analisis interaksi kompleks enzim-ligan menunjukkan bahwa terdapat 16 Contact residu dan sembilan residu asam amino enzim yang membentuk ikatan hidrogen dengan ligan serta terjadi kesesuaian konformasi ligan terhadap binding site enzim.