

Penapisan Senyawa Bioaktif dari Suku Zingiberaceae sebagai Penghambat Neuraminidase Virus Influenza A (H1N1) melalui Pendekatan Docking

Fadilah, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20278070&lokasi=lokal>

Abstrak

Influenza A (H1N1) adalah penyakit yang disebabkan oleh infeksi virus Influenza type A subtype H1N1. Influenza ini telah menjadi masalah kesehatan utama di negara tropis dan subtropis. Virus ini selalu mengalami mutasi dan menjadi resisten terhadap obat-obat yang digunakan. Pada penelitian ini dilakukan penapisan senyawa bioaktif dari famili jahe-jahean (Zingiberaceae) yang dapat berperan sebagai inhibitor neuraminidase virus Influenza melalui pendekatan docking.

Hasil evaluasi mengindikasikan bahwa senyawa 1,2-di-O- -D-glucopyranosyl-4-allylbenzene (BGA) memiliki afinitas dan kemampuan untuk menghambat neuraminidase. Untuk mengetahui interaksi dan kontak residu digunakan senyawa standard zanamivir dan isoliquertigenin. Kontak residu senyawa BGA terhadap neuraminidase terdapat 14 kontak residu dan 8 kontak residu dengan sisi katalitik enzim. Hasil docking menunjukkan bahwa BGA memiliki energi binding dan affinitas yang lebih baik dibandingkan dengan senyawa bioaktif lainnya dan juga dengan standard.

.....Influenza A (H1N1) is a disease caused by infection of Influenza A virus subtype H1N1. It has become a major health problem in tropical and subtropical countries. This virus constantly mutates and consequently drug-resistant strains emerge. In this research, we have conducted docking study to screen bioactive compounds from Zingiberaceae family, which has a role as neuraminidase inhibitor of Influenza A virus. The docking result identified that 1,2-di-O- -D-glucopyranosyl-4-allylbenzene (BGA) compound has affinity and ability to inhibit neuraminidase. To understand the interaction and contact residues of complex, we used Zanamivir (ZNM) and Isoliquertigenin (ILG) as standards. There are indications of fourteen contact residues of BGA compound to neuraminidase and eight contact residues of enzyme that formed hydrogen bonds with catalytic site. The docking result showed that BGA has better binding energy and affinity than other bioactive compounds and the standards used.