

Penapisan analog senyawa pengikat kantong -OG sebagai inhibitor fusi virus dengue tipe 2 = Screening analogs of -OG pocket binder as fusion inhibitor of dengue virus type 2

Hilyatuz Zahroh, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20364657&lokasi=lokal>

Abstrak

Dengue merupakan merupakan penyakit infeksi yang disebabkan oleh virus dengue (DENV) dan ditularkan oleh nyamuk dari manusia satu ke manusia lainnya. Saat ini, Indonesia tercatat sebagai negara dengan kasus dengue terbanyak di ASEAN. Pengobatan untuk penyakit dengue saat ini hanyalah berupa terapi pendukung, dan belum tersedia obat antiviral untuk dengue. Dengan demikian, penelitian mengenai obat antiviral terhadap dengue sangat penting, terutama untuk mencegah ledakan wabah. Dalam penelitian ini, pengembangan obat antiviral untuk dengue dilakukan melalui inhibisi celah pengikatan -OG pada protein envelope DENV menggunakan beberapa analog dari senyawa yang dapat mengikat kantong -OG tersebut. Senyawa yang digunakan dalam penelitian ini berjumlah 828 senyawa dan seluruhnya ditapis berdasarkan hasil analisis molecular docking, prediksi sifat farmakologis senyawa dan simulasi dinamika molekul. Hasil analisis ketiga tahap tersebut didapatkan ligan terbaik adalah 5-(3,4-dichlorophenyl)-N-[2-(p-tolyl)benzotriazol-5-yl]furan-2-carboxamide yang berpotensi untuk digunakan sebagai kandidat obat antiviral dengue.

.....Dengue is an infectious disease caused by dengue virus (DENV) and transmitted between human hosts by mosquitoes. Nowadays, Indonesia is recorded as a country with the highest cases of dengue in ASEAN. Current treatment for dengue disease is supportive therapy; there is no antiviral drug against dengue available on the market. Therefore, the research about antiviral drug against dengue is very important, especially to prevent the outbreak explosion. In this research, the development of dengue antiviral is conducted through the inhibition of -OG binding pocket on Envelope protein of DENV by using analogs of -OG pocket binder. There are 828 compounds used in this study and all of them were screened based on the analysis of molecular docking, pharmacological character prediction of the compounds and molecular dynamics simulation. The result of these analyses revealed the compound that can be used as an antiviral candidate against dengue virus is 5-(3,4-dichlorophenyl)-N-[2-(p-tolyl)benzotriazol-5-yl]furan-2-carboxamide.