

Virtual screening peptida siklis komersial sebagai inhibitor og pocket binder pada virus dengue tipe 2 = Virtual screening of commercial cyclic peptides as inhibitor og pocket binder in dengue virus type 2

Vincentia Cheryl Adam, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20412065&lokasi=lokal>

Abstrak

Virus Dengue (DENV) menyebabkan infeksi penyakit yang mengancam sekitar 40% populasi dunia. Hingga saat ini belum tersedia obat antiviral yang dapat digunakan sebagai upaya pengobatan penyakit yang disebabkan infeksi DENV. Dengan melakukan virtual screening terhadap 308 peptida siklis komersial, dicari kandidat obat yang mampu menginhibisi sebuah situs pengikatan -OG yang terdapat pada protein envelope DENV. Melalui metode simulasi penambatan dan dinamika molekul serta analisis terhadap sifat farmakologi dan toksisitas dari senyawa-senyawa peptida yang ditapis, diketahui ligan Cyclo(-D-Trp-Tyr) memiliki afinitas yang baik dengan situs pengikatan -OG binding pocket serta diprediksi memiliki sifat sebagai obat yang relatif baik. Ligan tersebut juga membentuk kompleks yang stabil dengan protein envelope pada temperatur 310 K dan 312 K. Ligan Cyclo(-D-Trp-Tyr) memiliki potensi sebagai inhibitor -OG binding pocket untuk selanjutnya dikembangkan menjadi obat antiviral terhadap infeksi DENV.

.....

Dengue Virus (DENV) has caused infectious disease which put roughly 40% of world population at risk. Antiviral drug against DENV infection remains unavailable up until now. By screening to 308 commercial cyclic peptides virtually, this research aims to find drug candidate which can inhibit -OG binding site. Through molecular docking and molecular dynamics simulation, along with pharmacology and toxicity analyzing, it is discovered that Cyclo(-D-Trp-Tyr) ligand has good affinity with -OG binding pocket and is predicted to has relatively acceptable drug properties. Ligand forms stabile complexity with nvelope protein in 310 K and 312 K. Cyclo(-D-Trp-Tyr) ligand is revealed to be potential inhibitor of -OG binding pocket. Thus, it is feasible for furher development as antiviral drug against DENV infection.