

Penapisan virtual senyawa dari basis data tanaman herbal Indonesia sebagai inhibitor DNA metiltransferase (DNMT) = Virtual screening of Indonesian herbal database as DNA methyltransferase (DNMT) inhibitor

I Gusti Ngurah Raka Bhaskara Wilaputraka, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20432162&lokasi=lokal>

Abstrak

Hipermetilasi DNA adalah sebuah proses epigenetik abnormal yang dikatalis oleh DNA Metiltransferase dan merupakan salah satu faktor penyebab munculnya penyakit tidak menular seperti kanker, diabetes, dan penyakit gangguan metabolisme lainnya. Hipermetilasi DNA dapat dihambat dengan inhibitor DNA Metiltransferase1 (DNMTi). Penelitian ini dilakukan dengan tujuan menemukan kandidat inhibitor DNA Metiltrasferase yang berasal dari bahan alam. Pencarian senyawa yang berpotensi sebagai inhibitor dilakukan dengan penapisan virtual terhadap basis data senyawa aktif tanaman herbal Indonesia (HerbalDB) menggunakan peranti lunak Autodock Vina. Dua puluh lima senyawa yang diketahui memiliki efek inhibisi terhadap DNMT1 digunakan sebagai kontrol positif dan sebagai referensi untuk membuat pengecoh menggunakan Directory of Useful Decoys: Enhanced. Penapisan yang dilakukan mendapatkan lima senyawa aktif yang berpotensi sebagai inhibitor DNA metiltransferase 1 yaitu Procyanidin B2, Ent-epicatechin-4alpha-8-ent-epicatechin, Epicatechin-4beta-8-epicatechin-3-o-gallate, Neorhusflavanone, dan Cyanidin-3-6"-caffeylsophoroside-5-glucoside.

.....

DNA Hypermethylation is an abnormal epigenetic process catalyzed by DNA Methyltransferase 1 (DNMT1), it is also one of the factor causing non-communicable disease such as cancer, diabetes, and other metabolic disease. DNA hypermethylation can be suppressed by DNA Methyltransferase inhibitor (DNMTi). This study was conducted to obtain inhibitor candidate from natural products. The search for potential inhibitors was done by conducting a virtual screening against Indonesian Herbal Compound Database (Herbal DB) utilizing Autodock Vina as docking software. Twenty-five compounds known for their inhibitory activity against DNMT1 were used as actives and as reference for generating decoys, facilitated by Directory of Useful Decoys: Enhanced. The virtual screening yields five potential DNMT1 inhibitor, Procyanidin B2, Ent-epicatechin-4alpha-8-ent-epicatechin, Epicatechin-4beta-8-epicatechin-3-o-gallate, Neorhusflavanone, and Cyanidin-3-6"-caffeylsophoroside-5-glucoside.