

Penapisan virtual berbasis pemetaan farmakofor untuk identifikasi inhibitor potensial virus ebola VP35 = Pharmacophore mapping-based virtual screening for identification of potential ebola virus VP35 inhibitor

Atika Marnolia, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20477444&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Virus ebola EBOV merupakan virus patogen yang dapat menyebabkan kematian pada manusia dan makhluk primata. Data WHO pada Maret 2016 menunjukkan bahwa sebanyak 11,323 kasus dinyatakan meninggal dari 28,646 kasus yang dilaporkan. Kasus ini tidak hanya terjadi di Afrika, tetapi juga sudah terjadi di Itali, Spanyol, Amerika dan Inggris. Penting untuk menemukan kandidat obat yang mampu menghambat penyebaran virus ini. Salah satu protein yang dapat dijadikan sebagai target untuk menghambat EBOV adalah viral protein 35 VP35 . Protein ini akan menghambat transkripsi dari interferon, sehingga produksi interferon akan menurun. Pada penelitian ini, digunakan pangkalan data Universal Natural Product Database UNPD sebagai inhibitor. Ada beberapa metode komputasi yang digunakan untuk menemukan kandidat obat dari senyawa UNPD, yaitu metode Protein-Ligand Interaction Fingerprint PLIF , titik farmakofor, simulasi penambatan dan dinamika molekul serta uji farmakologi senyawa. Hasil dari berbagai proses ini menyimpulkan bahwa ligan UNPD161456 merupakan senyawa terbaik yang dapat dijadikan kandidat obat untuk menghambat VP35.

<hr />

ABSTRACT

Ebola virus is a pathogen virus that can be pathogenic in the human and non human primate. Based on data from WHO in March 2016 there are more than 11,323 deadly cases from 28,646 reported cases. This virus has been separated to another country, such as Italy, Spain, and USA. This is a challenge for scientists to find a drug that can inhibit this virus. Viral protein VP35 is the important target from this virus that can hamper the transcription of interferon, and the production of interferon will be decreased. In this research, Universal Natural Product Database UNPD is used as inhibitor. There are several computational methods that can be used to find drug candidate from UNPD. The methods are Protein Ligand Interaction Fingerprint PLIF , pharmacophore feature, molecular docking, molecular dynamics and pharmacological properties. In the end, a ligand with the code UNPD161456 is the best drug candidate that can inhibit VP35.