

Penapisan kandidat inhibitor glikoprotein sudan ebolavirus dari senyawa flavonoid untuk terapi ebola secara in silico = Screening of inhibitor candidate for sudan ebolavirus glycoprotein from flavonoid compound for ebola therapy using in silico

Rendy Pramuda Putra, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20487152&lokasi=lokal>

Abstrak

Demam berdarah Ebola adalah penyakit viral yang berasal dari genus Ebolavirus dan sangat mematikan jika masuk ke dalam tubuh primata termasuk manusia. Sampai sekarang, belum ada obat atau vaksin yang terbukti efektif melawan Ebolavirus. Salah satu spesies dari filovirus adalah Sudan Ebolavirus (SEBOV). Penyakit ini memiliki kemungkinan mematikan antara 50-70%. Dalam siklus hidupnya Ebola memiliki berbagai komponen yang penting untuk keberlangsungan virus ini, salah satunya glikoprotein. Glikoprotein dalam Ebola memiliki inti dalam struktur GP1-GP2 yang berfungsi dalam replikasi Ebola. Molekul yang dapat menghambat glikoprotein ini menjanjikan suatu peluang untuk dijadikan obat terapi bagi para penderita Ebola. Senyawa flavonoid memiliki potensi menjadi obat karena sifat antiviralnya. Dalam penelitian ini, metoda digunakan untuk memahami potensi antiviral senyawa flavonoid dengan menghambat GP SEBOV melalui penambatan molekul dan simulasi dinamika molekul dengan MOE (Molecular Operating Environment) 2014.09. Lebih lanjut, bioavailabilitas oral dan prediksi toksisitas juga dilakukan untuk mendapatkan senyawa flavonoid terbaik. Hasilnya didapatkan Cianidin-3-(p-koumaro) dengan afinitas ikatan terbaik kepada GP SEBOV dan sifat toksisitas yang baik.

Ebola Hemorrhagic Fever is a viral disease from the Ebolavirus genus and deadly to primates, including humans. Until now, no vaccine nor medicine could combat Ebolavirus effectively. One of the species from ebolavirus genus is Sudan Ebolavirus (SEBOV). SEBOV has a case fatality between 50-70%. In Ebola life cycle, Ebola has a different type of component which is very essential, one of them is glycoprotein (GP). GP has a GP1-GP2 core structure, which is crucial for mediate Ebolavirus and the host cell. Thus, any molecule that could inhibit glycoprotein has a potential to become an ideal therapeutics of Ebola hemorrhagic fever. Flavonoid compounds have potential because of their antiviral property. In this research, in silico method was conducted to understand the antiviral potential of flavonoid compound by inhibiting the SEBOV GP through molecular docking and molecular dynamics simulation using Molecular Operating Environment (MOE) 2014.09. Moreover, the oral bioavailability and toxicity prediction of the flavonoid compounds were also performed to get the best flavonoid compounds. In the end, we found that Cyanidin-3-(p-coumaro) with the best binding affinity to SEBOV GP and have low toxicity properties.