

Modifikasi senyawa asam 18-beta-glisiretinat dan likokalkon A secara in silico sebagai inhibitor nukleoprotein virus ebola = Modification of 18-beta-glycyrrhetic acid and licochalcone A by in silico study as ebola virus nucleoprotein inhibitors

Andrei Bernadette, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20494523&lokasi=lokal>

Abstrak

Virus Ebola (EBOV) adalah salah satu virus paling mematikan di dunia yang memiliki virus wabah pada tahun 2014 di Afrika Barat. Ada lima jenis virus Ebola, Zaire (ZEBOV), Sudan (SEBOV), Pantai Gading (CEBOV), dan Bundibugyo (BEBOV). Virus ini sudah terbunuh sekitar 11.310 hidup dari 28.616 kasus, dan sampai sekarang tidak ada antivirus untuk EBOV. Salah satunya protein potensial yang bisa dihambat adalah Nucleoprotein (NP). EBOV NP ini memiliki fungsi sebagai replikasi virus dan perancah untuk protein virus tambahan. Dengan menghambat virus ini, itu dapat memotong replikasi RNA dan mengakhiri siklus hidup virus EBOV. Dari sebelumnya penelitian, Fu et al, menyatakan bahwa EBOV NP dapat disisipkan dengan asam 18-glycyrrhetic dan licochalcone A. Dalam penelitian ini, kami menggunakan modifikasi asam 18-glycyrrhetic dan licochalcone A menggunakan metode farmakofor untuk menghambat EBOV NP dan membandingkan yang terbaik ADMET mencetak skor untuk mendapatkan ligan baru sebagai penghambat nukleoprotein. Penelitian ini menggunakan MOE (Lingkungan Operasi Molekuler) 2014.09 dan DataWarrior v4.7.3. Ini dimodifikasi ligan ingin memiliki hasil yang lebih baik daripada ligan standar. Dalam penelitian ini, dimodifikasi senyawa 541 dari asam 18-glycyrrhetic dan senyawa termodifikasi 207 dari licochalcone A dipilih sebagai antivirus EBOV.

<hr>

The Ebola Virus (EBOV) is one of the deadliest viruses in the world that had an outbreak virus in 2014 in West Africa. There are five types of Ebola viruses, Zaire (ZEBOV), Sudan (SEBOV), Ivory Coast (CEBOV), and Bundibugyo (BEBOV). This virus has been killed around 11,310 lives out of 28,616 cases, and until now there is no antivirus for EBOV. One of the potential proteins that can be inhibited is Nucleoprotein (NP). This EBOV NP has a function as a viral replication and scaffold for additional viral proteins. By inhibiting this virus, that can cut RNA replication and end the life cycle of the EBOV virus. From previous studies, Fu et al. Stated that EBOV NP can be inserted with 18-glycyrrhetic acid and

licochalcone A. In this study, we used a modification of 18-glycyrrhetic acid and licochalcone A used a pharmacophore method to inhibit EBOV NP and compared the best ADMET score to get a new ligand as a nucleoprotein inhibitor. This research uses MOE (Molecular Operating Environment) 2014.09 and DataWarrior v4.7.3. This modified ligand wants to have better results than standard ligands. In this study, it was modified compound 541 from 18-glycyrrhetic acid and 207 modified compound from licochalcone A selected as an EBOV antivirus.