

Penapisan virtual peptida siklik komersial untuk menginhibisi virus dengue dengan protein NS5 RNA polimerase = Virtual screening of commercial cyclic peptide to inhibit dengue virus by the suppression of NS5 RNA-dependent RNA polymerase

Saskhia Leony Theana Putri, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20510269&lokasi=lokal>

Abstrak

Dengue sebagai salah satu penyakit mematikan dan telah berevolusi sejak 50 tahun yang lalu. Virus yang menyebabkan penyakit ini, termasuk kedalam kategori B Arthropod Borne Virus (Arboviroses) pada genus Flavivirus, famili Flaviviridae, dan memiliki 5 jenis serotipe, yaitu; Dengue Virus (DENV)-1, Dengue Virus DENV-2, Dengue Virus DENV-3, Dengue Virus DENV-4 dan, Dengue Virus DENV-5. Penyakit ini sering disalah artikan sebagai penyakit flu karena kemiripan gejalanya mampu merenggut nyawa apabila sudah masuk ke tahap yang cukup berat dengan gejala-gejala yang cukup serius. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan senyawa peptida siklis komersil yang berpotensi sebagai kandidat obat untuk memerangi virus dengue. Penelitian ini dilaksanakan melalui metode in silico dengan menggunakan metode virtual screening, molecular docking dan dengan target protein viral dari virus DENV NS5 RNA-Polimerase. Penambatan ligan peptida siklis didapatkan berdasarkan struktur 3D dari virus DENV NS5 RNA-Polimerase yang diperoleh dari Protein Data Bank serta menggunakan perbandingan ligan standar yang merupakan senyawa yang telah diketahui memberi efek inhibisi terhadap DENV NS5 RNA polimerase. Kemudian, dilakukan pemodelan menggunakan perangkat lunak MOE 2014.09. Kemudian hasil yang diperoleh selanjutnya dilakukan proses uji ADMET untuk mengetahui tingkat keamanan dari senyawa tersebut pada makhluk hidup. Dari penelitian ini didapatkan beberapa senyawa inhibitor yang baik untuk menghambat pertumbuhan dan replikasi dari virus dengue. Senyawa seperti N-acyl-Taurine Geodiataurine, Atazanafir, dan Nostoperin dinilai cukup baik dari segi stabilitas, energi ikatan, dan sifat admet.

.....Fever is one of the deadliest disease that spreads through mosquitoes. This disease has claimed many victims since the beginning of its development 30 years ago. It belongs to category B Arthropod Borne Virus (Arboviroses) which belongs to the genus Flavivirus, family Flaviviridae, and has 5 types of serotypes, namely; (Dengue Virus) DENV-1, DENV-2, DENV-3, DENV-4 and, DENV-5. The disease, which is often mistaken for flu because of the similarity in symptoms, can take lives, is quite severe with serious conversations, such as severe stomach problems, persistent, constantly rapid, bleeding gums, due to anxiety. In this study, an updated discovery will be sought which is requested as a drug to release the dengue virus. This research was carried out through a method in silico using pharmacophore, virtual screening, molecular docking and fragment growth with virus target proteins from the DENV NS5 RNA-Polymerase virus. Tethering of commercial cyclic peptide ligand molecules is obtained based on the 3D structure of the DENV NS5 RNA-Polymerase virus obtained from the Protein Data Bank with code (PDB ID: 2J7U) with standard ligands obtained from company data for sale of related peptides and then modeled using the device software MOE 2014.10. Then the results are carried out growing fragments in order to get an updated composition.