

Identifikasi senyawa flavonoid sebagai inhibitor enzim alfa-glukosidas 1 untuk pengobatan penyakit dengue dengan pendekatan komputasional = In silico identification of flavonoid compounds as the -glucosidase 1 inhibitor for dengue fever treatment.

Puja Andana, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20514777&lokasi=lokal>

Abstrak

Kawasan tropis dan subtropis merupakan tempat yang sesuai untuk berkembangnya virus dengue. Virus ini penyebarannya kepada manusia melalui nyamuk aedes aegypti. Dari data WHO sekitar 50-100 juta kasus infeksi dengue terjadi di seluruh dunia setiap tahunnya, tetapi belum terdapat vaksin maupun antivirus yang bisa mencegah dan mengobati penyakit ini. Pengembangan antiviral untuk infeksi DENV seringkali mengalami kendala. Hal ini disebabkan karena DENV memiliki lebih dari satu jenis serotipe.

Pengembangan sebuah antiviral yang dapat menangani infeksi dari semua jenis serotipe DENV sangat diperlukan. Antiviral ini dapat dikembangkan melalui inhibisi protein inang yang terlibat dalam siklus hidup DENV. Salah satu protein inang yang dapat dijadikan target adalah enzim - glucosidase I. Enzim ini memiliki peran penting dalam proses pematangan envelope glikoprotein dari DENV. Pengembangan antiviral berbasis penautan fragmen secara in silico dapat menghasilkan kandidat obat terbaru dengan afinitas pengikatan yang baik. Tujuan dari penelitian ini adalah memanfaatkan bahan alam flavonoid untuk menghambat aktivitas enzimatik dari sisi aktif enzim alfa-glukosidase 1 yang berperan dalam mensintesis cap-RNA virus dengue. Metode yang digunakan pada penelitian secara in silico ini adalah metode penapisan virtual (virtual screening). Senyawa inhibitor yang digunakan adalah ligan flavonoid yang diunduh dari pangkalan data PubChem. Penelitian ini akan melakukan penambatan molekul (molecular docking) terhadap inhibitor pada sisi aktif protein target. Selanjutnya, pada senyawa inhibitor terbaik dilakukan uji farmakologi untuk mengetahui kesesuaian karakteristik senyawa kandidat dengan karakteristik senyawa obat yang telah beredar di pasaran.

.....The tropical and subtropics area is a suitable place to develop its viral dengue, this virus is a message to mankind through the mosquito Aedes egypti, from the data WHO around 50- 100 million cases of dengue worldwide infections each year. But there is no vaccine or antivirus that can prevent and treat this disease. The antiviral development for DENV infections is often subjected to problems. This is due to DENV having more than one type of serotype. The development of an antiviral that can handle infections of all types of DENV serotypes is indispensable. This antiviral can be developed through the inhibition of host proteins involved in the DENV lifecycle. One of the host proteins that can be targeted is the enzyme -glucosidase I. This enzyme has an important role in the proeses of maturation of envelope glycoprotein from DENV. The development of fragment-based antiviral in silico can result in renewable drug candidates with good binding affinity the purpose of this study is to utilize natural ingredients of flavonoids to hyddate the enzymatic activity of The active side of the enzyme alpha-glucosidase 1 which plays a role in synthesizes cap-RNA virus with dengue. The method used in silico in this study is a virtual screening method. The inhibitor compounds used are the Flavonod ligands downloaded from the PubChem database. This research will conduct molecular docking against inhibitors on the active side of the target proteins. Furthermore, the best inhibitor compounds will be conducted pharmacological test to be used as a candidate for drug.