

Pemodelan Dinamika Molekuler Ligan Fisetin, Galangin, Myricetin Dan Quercetin Terhadap Target RNA Dependent RNA Polymerase Virus Dengue Serotype 3. = Molecular Dynamics Modeling Ligan Fisetin, Galangin, Myricetin and Quercetin Against Dengue Virus Serotype 3 RNA Dependent RNA Polymerase

Muhamad Yusup Yandi, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20515081&lokasi=lokal>

Abstrak

Demam berdarah merupakan penyakit infeksi yang disebabkan oleh virus dengue dengan tipe DENV-1, DENV-2, DENV-3, dan DENV-4. Antigen dari masing-masing tipe virus berbeda-beda, sehingga sampai saat ini belum ditemukan obat-obatan paten yang ampuh dalam melawan virus dengue. Penelitian secara *in silico* dilakukan sebagai penelitian pendahuluan untuk mempermudah pencarian senyawa penuntun untuk dilanjutkan pengujian secara *in vitro* dan *in vivo*. Senyawa bioflavonoid diantaranya fisetin, galangin, dan myricetin. Penelitian dilakukan untuk melihat potensi ligan fisetin, galangin, dan myricetin di mana variabel kontrol adalah quercetin terhadap Rdrp dari virus dengue. Metode penelitian menggunakan penambatan molekuler dan dinamika molekuler. Hasil simulasi senyawa flavonol dibandingkan dengan quercetin, dengan parameter penilaian penambatan molekuler, energi ikatan, Root Mean Square Deviation (RMSD), Root Mean Square Fluctuation (RMSF), dan kontak ligan-target. Hasil nilai penambatan molekuler untuk masing-masing ligan terendah yaitu myricetin, fisetin, quercetin, dan galangin dengan nilai docking score berturut-turut yaitu -10,145 kcal/mol, -9,796 kcal/mol, -8,513 kcal/mol, dan -8,036 kcal/mol. Hasil MM-GBSA energi ikatan terbaik adalah ligan fisetin, quercetin, myricetin, dan galangin dengan nilai ikatan energi bebas secara berturut-turut yaitu -60,65 kcal/mol, -57,83 kcal/mol, -57,19 kcal/mol, dan -51,36 kcal/mol. Hasil dari studi ini memprediksi bahwa quercetin tetap menjadi inhibitor terhadap target RNA dependent RNA polymerase (Rdrp) yang lebih baik dibandingkan Fisetin, Galangin, dan Myricetin.

.....Dengue fever is an infectious disease caused by the dengue virus with types DENV-1, DENV-2, DENV-3, and DENV-4. The antigen of each virus type is different, so that until now there has not been found any patent drugs that are effective against the dengue virus. *In silico* research was conducted as a preliminary study to facilitate the search for guiding compounds to be continued *in vitro* and *in vivo* testing.

Bioflavonoid compounds include fisetin, galangin, and myricetin. The study was conducted to see the potential of fisetin, galangin, and myricetin ligands in which the control variable was quercetin against Rdrp from the dengue virus. The research method uses molecular docking and molecular dynamics. The simulation results of flavonol compounds were compared with quercetin, with parameter value of the docking score, bond energy, Root Mean Square Deviation (RMSD), Root Mean Square Fluctuation (RMSF), and contact ligand-target. The results of the lowest molecular docking values for each ligand were myricetin, fisetin, quercetin, and galangin with docking scores of -10.145 kcal/mol, -9.796 kcal/mol, -8.513 kcal/mol, and -8.036 kcal/mol respectively. The best binding energy MM-GBSA results were ligands fisetin, quercetin, myricetin, and galangin with free energy bond values -60.65 kcal/mol, -57.83 kcal/mol, -57.19 kcal/mol, and -51.36 kcal/mol respectively. The results of this study predict that quercetin remains a better inhibitor against RNA dependent RNA polymerase (RdRp) targets than Fisetin, Galangin, and Myricetin