

Studi Penambatan Molekul Senyawa Flavonoid sebagai Inhibitor Enzim InhA Bakteri Mycobacterium Tuberculosis = Molecular Docking Study of Flavonoid as the Inhibitor of Mycobacterium tuberculosis InhA Protein

Aditya Raka Sabila Isliyana, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20525266&lokasi=lokal>

Abstrak

Tuberkulosis adalah bakteri penyebab penyakit infeksi menular yang disebabkan oleh Mycobacterium tuberculosis. Robert Koch menemukan bakteri Mycobacterium tuberculosis pada tanggal 2 Maret 1882. Penyakit tuberkulosis selama ini diobati dengan senyawa yang menghambat kerja salah satu enzim pada bakteri tersebut. Umumnya bakteri ini dapat diobati dengan isoniazid atau rifampin, atau kombinasi senyawa tersebut yang nantinya akan dibiosintesis oleh bakteri dan menghasilkan produk yang dapat menghambat kerja enzim InhA dalam bakteri tersebut. InhA adalah suatu enzim yang terdapat pada bakteri genus Mycobacterium yang berperan dalam pembentukan asam mikolat yang merupakan senyawa utama pada dinding sel bakteri genus tersebut, sehingga bakteri tersebut dapat dikendalikan dengan menggunakan obat yang dapat mengganggu kerja enzim tersebut. Namun beberapa mutasi pada InhA pada rantai 94 yang merubah asam amino serin menjadi alanin dalam bakteri genus Mycobacterium membuat bakteri tersebut resisten dengan isoniazid, sehingga dibutuhkan jenis antimikroba baru yang dapat menghambat pertumbuhan bakteri tersebut. Senyawa flavonoid dikenal sebagai senyawa bahan alam yang relatif aman dalam berbagai penggunaannya dan juga memiliki sifat antimikroba yang menarik perhatian dunia kesehatan. Dalam penelitian ini, akan dicari kandidat obat baru dari senyawa golongan flavonoid. Penelitian dilakukan dengan cara in silico. Untuk simulasi molecular docking, digunakan software MOE 2014.09 untuk mendapat informasi energi yang dilepas saat enzim berikatan dengan ligan dan nilai RMSD dari ikatan tersebut. Melalui uji farmakologi dengan pkCSM, 8 dari 10 senyawa flavonoid memiliki sifat toksisitas, sehingga hanya 2 senyawa flavonoid yang dapat menjadi kandidat obat tuberkulosis

.....Tuberculosis is an infecting contagious disease that caused by Mycobacterium tuberculosis. Robert Koch first to discover Mycobacterium tuberculosis bacteria at 2 March 1882. Tuberculosis disease can be cured by substance that can inhibit one of the enzyme in that bacteria. Generally this bacteria can be cured by isoniazid or rifampin, or combination of that substance later will be biosynthesized by that bacteria and make a product that can inhibit InhA enzyme of that bacteria. InhA are one of the enzyme that found in Mycobacterium genus bacteria that used in mycolic acid synthesis that make up the cell wall of that bacteria, therefore that bacteria can be controlled by drug that can disturb that enzyme work. But some mutation of InhA of the bacteria at chain number 94 that change from amino acid serine to alanine make the bacteria more resist against the isoniazid, therefore there is urgency to find new antimicrobe that can inhibit the bacteria growth. Flavonoid substances known for their antimicrobe properties that caught attention in pharmation world. In this research will find new drug candidate from flavonoids. The research will run in silico. For molecular docking simulation, MOE 2014.09 software will be used to get information about energy released by protein and ligand binding and RMSD value from the bond. From pharmacological studies with pkCSM, 8 out of 10 have toxicity properties, therefore only 2 flavonoid substances that can be new drug candidate for tuberkulosis.