

Simulasi Dinamika Molekuler Interaksi Peptida LL-37 dengan Protein Envelope dan Non-struktural 1 Zika Virus = Molecular Dynamics Simulation of the LL-37 Peptide Interaction with Zika Virus Envelope and Non-structural 1 Protein

Rafi Wikrama Sahasika, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920545216&lokasi=lokal>

Abstrak

Virus Zika adalah penyakit neurologis yang penyebarannya disebabkan oleh nyamuk *Aedes aegypti*. Ciri khas dari penyakit neurologis dibandingkan penyakit yang lain adalah kerusakannya bersifat permanen. Virus Zika tidak memberikan gejala pada orang yang terinfeksi. Akan tetapi, virus ini dapat diturunkan kepada bayi sehingga menghasilkan potensi keturunan yang cacat secara fisik dan kognitif dengan cara meninhibisi pembelahan sel saraf pada bayi. Virus Zika merupakan suatu permasalahan global dimana belum ada obat yang telah paten untuk mengobati atau inhibisi kerja Virus Zika. Walaupun demikian, terdapat peptida yang disintesis dari sel epitel mamalia, yaitu human cathelicidin LL-37, dan telah terbukti untuk menunjukkan aktivitas inhibisi dari berbagai jenis virus termasuk Virus Zika. Di sini akan dilakukan penelitian secara *In Silico* untuk menjelaskan bagaimana human cathelicidin LL-37 berinteraksi dengan Virus Zika secara molekuler. Penelitian kali ini akan menggunakan satu protein struktural, yaitu envelope, dan satu protein nonstruktural, yaitu Non-struktural 1. Penelitian ini memiliki tiga tahap utama, yaitu melengkapi struktur menggunakan AVOGADRO dan MODELLER, penambatan molekuler menggunakan HDOCK, serta dinamika molekuler menggunakan GROMACS. Hasil dari dinamika molekuler ini adalah peptida LL-37 yang terbukti baik untuk menginhibisi protein pada Virus Zika, tetapi D-LL-37 lebih unggul karena membuat protein bergerak lebih banyak. Akan tetapi, pergerakan protein ini juga membuat struktur D-LL-37 menjadi lebih mudah hancur.

.....The Zika Virus is a neurological disease that is spread by the *Aedes aegypti* mosquito. The distinctive feature of neurological diseases compared to other diseases is that the damage is permanent. The Zika virus does not cause symptoms in infected people. However, this virus can be passed on to babies, resulting in potential offspring who are physically and cognitively disabled by inhibiting nerve cell division in babies. The Zika virus is a global problem where there is no patented drug to treat or inhibit the action of the Zika virus. However, there is a peptide synthesized from mammalian epithelial cells, namely human cathelicidin LL-37, and has been proven to exhibit inhibitory activity against various types of viruses including the Zika Virus. Here, *In Silico* research will be carried out to explain how human cathelicidin LL-37 interacts with the Zika Virus molecularly. This study will use one structural protein, namely the envelope, and one non-structural protein, namely Non-structural 1. This research has three main stages, namely completing the structure using AVOGADRO and MODELLER, molecular docking using HDOCK, and molecular dynamics using GROMACS. The result of these molecular dynamics was the LL-37 peptide which proved to be good at inhibiting proteins in the Zika Virus, but D-LL-37 is superior because it makes the protein move more. However, this protein movement also makes the structure of D-LL-37 more easily destroyed.