

Penapisan Virtual Kandidat Inhibitor Penicillin-Binding Protein 2a (PBP2a) Dari Pangkalan Data Herbaldb Menggunakan Penambatan Molekuler = Virtual Screening of Penicillin-Binding Protein 2a (PBP2a) Inhibitor Candidate From HerbalDB Database with Molecular Docking

Muhammad Ruz'an Awwal Akbar Tafdhila, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920550180&lokasi=lokal>

Abstrak

MRSA (Methicillin-Resistant Staphylococcus aureus) adalah jenis spesies bakteri *S. aureus* yang resisten terhadap antibiotik metisilin dan antibiotik beta laktam lainnya. Infeksi MRSA menjadi salah satu penyebab utama infeksi nosokomial dan sering kali terkait dengan tingkat kesakitan, kematian, durasi rawat inap yang panjang, dan beban biaya yang substansial. Resistensi MRSA dikaitkan dengan produksi jenis enzim PBP2 baru yaitu PBP2a yang memiliki afinitas yang rendah terhadap -laktam. Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan parameter optimum untuk penapisan virtual dengan metode penambatan molekuler senyawa inhibitor PBP2a menggunakan AutoDock Vina serta mendapatkan 10 kandidat senyawa yang berpotensi sebagai inhibitor PBP2a dari hasil penambatan menggunakan parameter optimum. Pada penelitian ini dilakukan penapisan virtual kandidat inhibitor penicillin-binding protein 2a (PBP2a) dari pangkalan data HerbalDB menggunakan penambatan molekuler. Proses optimasi dan validasi menghasilkan parameter terbaik adalah ukuran gridbox 20,625Å x 20,625Å x 20,625Å dengan exhaustiveness 16 menggunakan Autodock Vina yang menghasilkan nilai EF1% 0 dan AUC 0,6428. Berdasarkan hasil penapisan diperoleh 10 peringkat senyawa terbaik menggunakan Autodock Vina yaitu, 7-(2"-p-coumaroylglucoside), 2''-o-galloylisovitexin, Prunin 6''-p-coumarate, Withanolide D, Epigallocatechin, 6-methoxypulcherrimin, Beta-cyclanoline, Artonin S, Quercetin 3-rhamnoside-7-glucoside, dan Epicatechin 3, 5-di-o-gallate.

.....MRSA (Methicillin-Resistant Staphylococcus aureus) is a type of *S. aureus* bacterial species that is resistant to the antibiotic methicillin and other beta lactam antibiotics. MRSA infection is one of the main causes of nosocomial infections and is often associated with high levels of morbidity, mortality, long duration of hospitalization, and substantial cost burden. MRSA resistance is associated with the production of a new type of PBP2 enzyme, namely PBP2a, which has a low affinity for -lactams. This study aims to obtain optimum parameters for virtual screening using the molecular docking method for PBP2a inhibitor compounds using AutoDock Vina and to obtain 10 candidate compounds that have the potential to act as PBP2a inhibitors from the docking results using optimum parameters. In this study, virtual screening of penicillin-binding protein 2a (PBP2a) inhibitor candidates was carried out from the HerbalDB database using molecular docking. The optimization and validation process resulted in the best parameters being a gridbox size of 20.625Å x 20.625Å x 20.625Å with exhaustiveness of 16 using Autodock Vina which resulted an EF1% value 0 and AUC 0.6428. Based on the screening results, the 10 best compound rankings were obtained using Autodock Vina, namely, 7-(2"-p-coumaroylglucoside), 2''-o-galloylisovitexin, Prunin 6''-p-coumarate, Withanolide D, Epigallocatechin, 6-methoxypulcherrimin, Beta-cyclanoline, Artonin S, Quercetin 3-rhamnoside-7-glucoside, and Epicatechin 3, 5-di-o-gallate.