

Studi pendahuluan perancangan inhibitor peptida potensial bagi enzim RNA Polymerase pada virus dengue secara in silico

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20181855&lokasi=lokal>

Abstrak

Penyakit demam berdarah dengue yang disebabkan virus dengue merupakan penyakit yang menjadi risiko pada negara-negara di daerah tropis dan subtropis, dengan kejadian tiap tahunnya mencapai 100 juta kasus. Sampai saat ini belum ditemukan adanya vaksin yang dapat mencegah terjadinya infeksi Olen karena itu diperlukan suatu upaya untuk menemukan obat berupa innibitor yang dapat menghambat enzim-enzim yang berperan pada replikasi virus dengue, salah satunya enzim RNA-dependent RNA polymerase (RdRp), yang berperan dalam penggandaan RNA virus dengue. Peptida dipilin menjadi innibitor yang potensial karena memiliki spesifitas dan aktivitas yang tinggi. Untuk meningkatkan kestabilan, peptida dirancang siklik dengan adanya jembatan disulfida. Peptida yang dirancang menggunakan kombinasi aspartat dan glutamat. Berdasar hasil docking diketahui bahwa peptida siklik dengan kombinasi residu CDEEC mempunyai nilai energi ikat yang terendah, yaitu sekitar -10,04 kkal/mol dan nilai K_i sebesar 43,44 nM yang mengindikasikan konformasi terstabil ligan-enzim, serta memiliki kontak dengan residu enzim dengan jumlah terbanyak yaitu 13 residu.