Universitas Indonesia Library >> UI - Skripsi Open

Perancangan pentapeptida siklik sebagai inhibitor kompetitif RAN-dependent RNA polymerase virus dengue secara molecular docking

Elyana Karimah, author

Deskripsi Lengkap: https://lib.ui.ac.id/detail?id=20181882&lokasi=lokal

---

Abstrak

Demam berdarah merupakan penyakit yang telan menjadi pandemik di daeran tropis dan subtropis dan ningga saat ini tidak ada vaksin yang dapat digunakan untuk mengobati infeksi akibat virus dengue. Upaya Iain untuk dapat mengnambat infeksi akibat virus ini, yaitu pengembangan antiviral. Salan satu target antiviral yang potensial acialan enzim RNA-dependent RNA polymerase (RdRp), yang berperan dalam proses replikasi RNA virus dengue dan sel manusia tidak memilikinya Peptida dipilin menjadi innibitor yang potensial karena memiliki spesifitas dan aktivitas yang tinggi. Untuk meningkatkan kestabilan, peptida dirancang siklik dengan adanya jembatan ciisulficia Pepticia yang dirancang menggunakan kombinasi aspartat, glutamat, glisin, serin, arginin, dan lisin. Kandidat Iigan dianalisis berdasarkan nasil docking dan drugsca/7. Ligan dengan energi bebas ikat terendah dan sesuai dengan kriteria obat kemudian dilakukan analisis terhadap interaksinya ciengan enzim. Ligan siklik CSGDC yang memenuhi kriteria obat ternyata dapat berikatan dengan sisi aktif enzim yaitu aspartat 533 dan aspartat 633, serta memiliki energi bebas ikat sekitar -29.6122 Kkal/mol. Pengamatan simulasi dinamika molekul pada tanap inisialisasi dilakukan untuk melihat perubahan interaksi Iigan ternadap enzim. Hasil pengamatan ternyata memperlihatkan banwa Iigan CSGDC masih berinteraksi dengan asam amino aspartat 663.