

Modifikasi laninamivir sebagai inhibitor neuraminidase virus influenza A subtype H1N1

Johannes Salim, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20214021&lokasi=lokal>

Abstrak

Virus influenza A subtype H1N1 menjadi perhatian kesehatan global karena memiliki patogenisitas yang tinggi disebabkan gen penyusunnya berupa RNA yang mudah mengalami mutasi. Pengobatan dengan antiviral (oseltamivir dan zanamivir) adalah salah satu upaya untuk mencegah pandemik influenza, namun terjadi resistansi terhadap obat antiviral tersebut. Resistansi ini sudah diatasi dengan penemuan laninamivir. Laninamivir terbukti mampu menghambat aktivitas neuraminidase virus influenza A dan B, termasuk subtype N1 sampai N9 dan virus yang resistan terhadap oseltamivir. Penelitian ini akan dilakukan drug design berbasis laninamivir, hal ini disebabkan laninamivir dapat menghambat kerja neuraminidase secara efektif, sehingga hasil modifikasi dari laninamivir dapat menghambat kerja neuraminidase lebih efektif daripada laninamivir itu sendiri. Proses molecular docking dilakukan untuk mendapatkan 3 ligan terbaik dari 336 ligan modifikasi. Hasil molecular docking menunjukkan bahwa AM3G1, CA3G1 dan F1G2 memiliki energi bebas ikatan dan interaksi yang lebih baik daripada standar. Selanjutnya dari hasil analisis toxicological properties secara keseluruhan ligan AM3G1, CA3G1, dan F1G2 tidak bersifat carcinogen dan mutagen.

.....Influenza A virus subtype H1N1 becomes a global concern because it has high pathogenicity, due to the constituent genes of the virus is RNA. Treatment with antiviral (oseltamivir and zanamivir) is the way to prevent pandemic influenza, but influenza virus resistance to antiviral drugs. This resistance has been overcome by laninamivir. Laninamivir proved able to inhibit neuraminidase activity of influenza A and B viruses, including subtypes N1 to N9 and viruses resistant to oseltamivir. This research was conducted to modify laninamivir-based

drug design, so that results of modified laninamivir can inhibit neuraminidase more effective than laninamivir itself. Molecular docking was conducted to get 3 best ligand modifications from 336 modifications. Results of molecular docking indicated that AM3G1, CA3G1 and F1G2 have interaction and free binding energy better than standards. Furthermore, the analysis of toxicological properties of the ligand AM3G1, CA3G1, and F1G2 shown that the ligands have noncarcinogen and non-mutagen.