

Analisis Aktivitas Mutasi HIV-1 Protease dari Model Pasien RY1 dan DY1 Terhadap Inhibitor Amprenavir dengan Metode Molecular Dynamic Simulation = Activity analysis of HIV-1 Protease Mutations of Patient Model RY1 and DY1 Against Amprenavir Inhibitor with Molecular Dynamic Simulation Method

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20314775&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Protease (PR) pada HIV berperan dalam proses maturasi virus agar dapat menginfeksi sel inang. Proses tersebut berlangsung dalam sisi aktif PR dengan memotong poliprotein virus. Banyaknya ragam mutasi residu PR membuat interaksi PR dengan obat yang diberikan dapat berbeda. Pasien dari Indonesia sendiri memiliki karakteristik galur tipe AE yang berbeda dengan galur B yang banyak ditemukan di negara-negara barat. Dua PR pasien dari Indonesia dengan kode RY1 (10 mutasi) dan DY1 (12 mutasi) disimulasikan dengan metode simulasi dinamika molekuler untuk meninjau interaksi antara kedua PR dengan obat amprenavir (APV). Berdasarkan hasil energinya, interaksi RY1-APV lebih kuat bila dibandingkan dengan DY1-APV. Hasil tersebut diperkuat dengan tinjauan struktural dan ikatan hidrogen terhadap residu mutasi yang dimiliki kedua pasien. Model pasien RY1 memiliki mutasi di residu ke-45 yang diketahui membantu mempertahankan interaksi PR-APV, sedangkan model pasien DY1 memiliki mutasi pada residu ke-10 yang diketahui mengurangi interaksinya dengan obat.

<hr>

ABSTRACT

<i>Protease (PR) on the HIV virus plays a role in the maturation process in order to infect host cells. The process takes place in the active site PR by cutting viral polyprotein. Many kinds of mutated residues at PR makes interaction with the drug can vary. Patients from Indonesia itself has AE type strain that has different characteristic with B type strain which are found in western countries. Two PR patients from Indonesia with RY1 code (10 mutations) and DY1 code (12 mutations) is simulated by molecular dynamics simulation methods to evaluate the interaction between two PR with amprenavir (APV). Based on the energy, RY1-APV interaction is stronger when compared to DY1-APV. These results are supported by structural insights and hydrogen bonding to residue mutations that occur in both patients. RY1 patient model have mutations in 45th residue, that is known to help maintain the interaction of PR-APV. While the DY1 patient model have mutations in the 10th residue, that is known to reduce the interaction with the drug.</i>