

Simulasi dinamika molekular enzim pfenr dengan analog triklosan dan inhibitor dari basis data herbal Indonesia = Molecular dynamic simulation of plasmodium falciparum enoyl acyl carrier protein reductase pfenr with analog triclosan and inhibitor from Indonesia herbal database

Achmad Fahry, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20368718&lokasi=lokal>

Abstrak

Sejalan dengan semakin tingginya resistensi terhadap obat antimalaria dalam klinis, terdapat kebutuhan dilakukan pencarian senyawa-senyawa kimia yang berpotensi. Metode komputasi digunakan untuk membantu pencarian karena memiliki keunggulan seperti tidak banyak mengeluarkan biaya dan dapat dipercaya memprediksi afinitas ikatan ligan dengan target obat (protein). Tujuan penelitian adalah untuk mendapatkan senyawa analog triklosan dan senyawa herbal Indonesia yang berpotensi sebagai antimalaria. Analog triklosan dan beberapa senyawa basis data herbal Indonesia dihitung afinitas ikatannya dengan metode Molecular Mechanics Poisson-Blotzmann Surface Area (MM-PBSA) pada Plasmodium falciparum Enoyl Reductase (PFENR), dengan tiga titik variabel suhu 27oC, 37oC, dan 39oC. Didapatkan nilai energi bebas Gibbs (G) pada analog triklosan enansiomer 1b -18,5009 kkal/mol suhu 37oC dan pada senyawa herbal spinasterol -31,3435 kkal/mol suhu 37oC dan limasin -24,9885 kkal/mol suhu 37oC. Dengan nilai energi bebas Gibbs tersebut menunjukkan bahwa senyawa tersebut memiliki potensi sebagai antimalaria.

Keeping pace with emerging drug resistance in clinically important pathogens will be greatly aided by inexpensive yet reliable computational methods that predict the ligands binding affinities for drug targets. the aim of this study to obtain potent antimalaria from analogues triclosan compound and Indonesia herbal compound. Analogues triclosan and several compound from Indonesia herbal database from Indonesia be calculated with molecular mechanics Poisson-Boltzmann surface area (MM-PBSA) for the Plasmodium falciparum Enoyl Reductase (PFENR), at three point variable of temperature 27oC, 37oC, and 39oC. Obtained Gibbs free energy (G) for analogues triclosan enansiomer 1b -18,5009 kkal/mol 37oC and for herbal compound spinasterole -31,3435 kkal/mol 37oC dan limacine -24,9885 kkal/mol 37oC. With that Gibbs free energy enansiomer 1a, spinasterole, and limacine shows that compound have potent as antimalaria.