

Optimasi parameter dan penapisan virtual basis data tanaman obat Indonesia sebagai inhibitor HIV-1 integrase menggunakan autodock dan vina = Parameter optimization and virtual screening Indonesian herbal database as HIV-1 integrase inhibitor using autodock and vina

Widya Dwi Aryati, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20386692&lokasi=lokal>

Abstrak

HIV-1 adalah subtype virus penyebab penyakit AIDS, penyakit yang dinilai paling berbahaya karena tingkat mortalitas, morbiditas, dan laju infektivitas yang tinggi. Kemunculan strain HIV mutan menyebabkan pengobatan yang sejauh ini menarget enzim protease dan reverse transcriptase menjadi kurang efektif. Pada penelitian ini dilakukan penapisan virtual senyawa dari basis data tanaman obat Indonesia sebagai inhibitor HIV-1 integrase menggunakan AutoDock dan AutoDock Vina yang divalidasi menggunakan basis data A Directory of Useful Decoys (DUD). Optimasi dilakukan dengan pemilihan ukuran grid, jumlah kalkulasi dan penambahan molekul air serta atom magnesium sebagai kofaktor. Dari penelitian ini, disimpulkan bahwa ukuran grid box terbaik adalah 57 x 57 x 57 menggunakan AutoDock Vina dengan nilai EF dan AUC masing-masing 3,93 dan 0,693. Terdapat 3 molekul air yang memiliki makna dalam penambatan molekuler di sekitar kantung ikatan. Berdasarkan hasil penapisan diperoleh 10 peringkat senyawa terbaik menggunakan AutoDock Vina yaitu, Kasuarinin, Mirisetin 3-O-(2",6"-di-O--ramnosil)--glukosida, 5,7,2',4'-Tetrahidroksi-6,3'-diprenilisoflavon 5-O-(4"-ramnosilramnosida), Mirisetin 3-robinobiosida, Sianidin 3-[6-(6-ferulilglukosil)-2-xilosilgalaktosida], Mesuein, Sianidin 7-(3-glukosil-6-malonilglukosida)-4'-glukosida, Kaemferol 3-[glukosil-(1->3)-ramnosil-(1->6)-galaktosida], 3-O-Galoilepikatekin-(4-->8)-epikatekin-3-O-galat, dan Kuersetin 4'-glukoronida.

.....HIV-1 is virus that causes AIDS, a disease that is considered the most dangerous because of the high mortality, morbidity, and infectivity. The emergence of mutant HIV strains have led that treatment to target protease, reverse transcriptase and integrase enzyme becomes less effective. In this study, virtual screening Indonesian herbal database as inhibitors of HIV-1 integrase is done using AutoDock and AutoDock Vina and validated using a database of the Directory of Useful Decoys (DUD). Optimization is done by selecting the grid size, the number of calculations and the addition of two water molecules and an magnesium atom as cofactor. From this study, it is concluded that the best size of the grid box is 57 x 57 x 57 using AutoDock Vina with EF and AUC values, 3.93 and 0.693, respectively. There are three important water molecules that have meaning in molecular docking around binding pocket. Based on this study, top ten ranked compounds were obtained using AutoDock Vina. The compounds are Casuarinin, Myricetin-3-O-(2",6"-di-O--rhamnosyl)--glucoside, 5,7,2',4'-Tetrahydroxy-6,3'-diprenylisoflavone 5-O-(4"-rhamnosylrhamnoside), Myricetin 3-robinobioside, Cyanidin 3-[6-(6-ferulylglucosyl)-2-xylosylgalactoside], Mesuein, Cyanidin 7-(3-glucosyl-6-malonylglucoside)-4'-glucoside, Kaempferol 3-[glucosyl-(1->3)-rhamnosyl-(1->6)-galactoside], 3-O-Galloylepicatechin-(4-à8)-epicatechin-3-O-gallate, and Quercetin 4'-glucuronide.