

Pembuatan pangkalan data senyawa kimia dari echinodermata dan penapisannya sebagai inhibitor transkriptase balik HIV-1 = Database compilation of chemical compounds from echinoderms and its virtual screening as HIV-1 reverse transcriptase inhibitor

Nurrahmah Nawwir Azzahra Masrur, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20412423&lokasi=lokal>

Abstrak

Human Immunodeficiency Virus (HIV) adalah virus yang menyerang sistem kekebalan tubuh dan sistem pertahanan infeksi seseorang sehingga menyebabkan penyakit AIDS. Berbagai upaya telah diarahkan untuk pengembangan terapi antiretroviral yang berfokus pada enzim-enzim HIV tipe 1 dengan menggunakan transkriptase balik, protease, dan integrase sebagai target yang potensial. Saat ini, penemuan obat mulai dilakukan dengan pencarian sumber-sumber alam dari ekosistem laut, yang telah dilaporkan memiliki aktivitas biologis, untuk mengeksplorasi berbagai senyawa bioaktif dari organisme laut. Namun, waktu dan biaya yang diperlukan untuk proses penemuan obat sangat besar. Hambatan ini dapat diatasi dengan mengurangi jumlah sampel melalui penggunaan penapisan *in silico*. Pada penelitian ini, dilakukan pembuatan pangkalan data senyawa kimia dari Echinodermata dan penapisan virtual senyawa-senyawa tersebut terhadap transkriptase balik. Pangkalan data dibuat dengan cara mengumpulkan data dari hasil pencarian literatur yang dilakukan oleh penulis. Penapisan dilakukan menggunakan piranti lunak AutoDock. Berdasarkan hasil penapisan, didapatkan 13 peringkat senyawa terbaik sebagai inhibitor transkriptase balik HIV-1, yaitu Nobilisidenol B, Ech_005, 17-Deoxyholothurinogenin, 22,25-Oxidoholothurinogenin, Ech_022, Ech_026, Ech_021, Nobilisidenol A, Ech_025, 5 β -Cholest-8(14)-ene-3 β ,7-diol, Astropectenol A, Ech_004, dan Phrygiasterol.

<hr>

Human Immunodeficiency Virus (HIV) is a virus that targets the immune system and weakens people's surveillance and defence systems against infections and causing AIDS disease. Various researches have been directed to the development of antiretroviral therapy that focuses on enzymes of HIV type 1 using reverse transcriptase, protease, and integrase as a potential target. New trends in drug discovery from natural sources emphasize on investigation of the marine ecosystem which have been reported having biological activities to explore bioactive compounds from marine organisms. However, time and cost required for drug discovery process are immense and at an unacceptable level. These obstacles can be overcome by reducing the number of samples using *in silico* screening. In this research, database compilation of chemical compounds from Echinoderm and virtual screening of the compounds were done to HIV-1 reverse transcriptase. Database was made by collecting data from any references which were searched by author. HIV-1 reverse transcriptase inhibitors virtual screening was done using AutoDock software. Based on the screening results, top thirteen ranked compound was obtained as hits, they are Nobilisidenol B, Ech_005, 17-Deoxyholothurinogenin, 22,25-Oxidoholothurinogenin, Ech_022, Ech_026, Ech_021, Nobilisidenol A, Ech_025, 5 β -Cholest-8(14)-ene-3 β ,7-diol, Astropectenol A, Ech_004, and Phrygiasterol.