

Penapisan peptida siklis komersial untuk menginhibisi protein non-struktural NS2B-NS3 protease DENV-2 melalui simulasi dinamika molekul = Screening of commercial cyclic peptides to inhibit non-structural protein NS2B-NS3 protease of DENV-2 through molecular dynamics simulation

Rahma Nissa Aini, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20413381&lokasi=lokal>

Abstrak

Penyakit yang disebabkan oleh infeksi virus dengue telah menjadi salah satu masalah kesehatan yang utama di dunia, terutama Asia, Afrika, dan Amerika. Infeksi ini telah menjadi endemik di lebih dari 100 negara. World Health Organization memperkirakan terjadi 100 juta kasus tiap tahun dan sebanyak 2,5 miliar orang atau 40% dari populasi dunia berisiko terjangkit infeksi virus ini. Oleh karena itu, dibutuhkan suatu pengobatan yang bersifat antiviral yang dapat menghambat aktivitas enzim yang berperan dalam replikasi di dalam tubuh. Akhir-akhir ini peptida telah dikembangkan dalam drug design. Dalam penelitian ini digunakan peptida yang sudah dipasarkan secara komersial.

Tujuan penelitian ini adalah untuk penapisan peptida siklis komersial yang dapat digunakan sebagai inhibitor protein NS2B-NS3 DENV melalui metode penambatan molekul dan simulasi dinamika molekul. Inhibisi terhadap enzim NS3 protease dapat menyebabkan terhambatnya aktivitas enzimatisnya sehingga poliprotein yang terbentuk dari translasi RNA menjadi tidak dapat dipotong-potong dan poliprotein tetap berada dalam bentuk satu untai panjang yang utuh. Akibatnya protein protein lain yang vital bagi keberlangsungan replikasi virus dengue tidak dapat terbentuk.

Penelitian ini menghasilkan ligan Atrial Natriuretic Factor (3-28) (human) sebagai kandidat obat terbaik. Simulasi dinamika molekul menunjukkan bahwa senyawa ini tetap stabil pada kenaikan suhu tubuh menjadi 312 K.

.....

A disease caused by dengue virus infection has become one of the major health problems in the world, especially Asia, Africa, and America. This infection has become endemic in more than 100 countries. The World Health Organization estimates that 100 million cases occur each year and as many as 2.5 billion people or 40% of the world population at risk of contracting this virus infection. Therefore, we need an antiviral that can inhibit the activity of enzymes involved in the replication in the body. Lately peptide drug design has been developed. This study uses peptides that has been marketed commercially.

The purpose of this study was to screen the commercial cyclic peptides that can be used as an inhibitor of NS3 protein NS2B DENV-through molecular docking and molecular dynamics simulations. Inhibition of NS3 protease enzyme can lead to inhibition of enzymatic activity so polyprotein formed from the translation of RNA can not be cut into pieces and polyprotein remain in the form of a long strand. Proteins that consequently vital for the sustainability of dengue virus replication can not be formed.

This research resulted Atrial natriuretic factor (3-28) (human) as the best drug candidate. Molecular dynamics simulations indicate that this compound remains stable at body temperature of 312 K.