

Potensi in vitro turunan asam galat sebagai kandidat antivirus dengue serotipe 2 dan studi in silico pada protein NS5 = In vitro potency of gallic acid derivatives as an antiviral candidate of dengue virus serotype 2 and in silico study on NS5 protein / Mahmudah

Mahmudah, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20434137&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Infeksi dengue (DENV) merupakan salah satu penyakit endemik di daerah tropis dan subtropis yang disebabkan oleh virus dengue melalui vektor nyamuk dari genus *Aedes*, khususnya oleh *Aedes aegypti* dan *Aedes albopictus*. Hingga saat ini belum ada pengobatan yang efektif untuk mengatasi infeksi dengue. Salah satu pengobatan baru yang dibutuhkan bersifat antivirus yang dapat menghambat aktivitas enzim yang berperan dalam replikasi di dalam tubuh. Pada penelitian ini dilakukan pengujian dari senyawa asam galat dan enam turunannya (benzil-, propil, dialil-, alil-, etil-, dan salisil galat) secara in vitro pada sel Huh7it-1 dengan DENV2 dan secara in silico dengan docking protein-ligan terhadap strain NGC dan 251 sekuens NS5 pada GenBank (NS5 konsensus). Salisil galat merupakan kandidat paling potensial secara in vitro (IC50: 12,18 μg/ mL, CC50: 259,35 μg/ mL, SI: 21,30) dan in silico (S: -16,793 kkal/ mol, pKi 3,344 μM). Propil galat dan etil galat ditemukan potensial secara in vitro (untuk propil galat, IC50: 13,19 μg/ mL, CC50: 241,85 μg/ mL, SI: 18,33; untuk etil galat, IC50: 14,39 μg/ mL, CC50: 185,60 μg/ mL, SI: 7,24), namun secara in silico paling rendah nilainya (untuk propil galat, nilai S: -11,908 kkal/mol, pKi 5,771 μM; untuk etil galat, nilai S: -5,513 kkal/mol, pKi 4,974 μM). Melalui docking pada sekuens konsesus NS5 diketahui, setiap jenis asam galat potensial tersebut dapat berikatan dengan masing-masing GLU715, LYS668, ASN701, THR584; ARG472, ASP663, ARG207; dan LYS139, ARG207. Secara keseluruhan, turunan asam galat hasil modifikasi memberikan hasil lebih baik dibandingkan dengan senyawa aslinya

<hr>

ABSTRACT

Dengue infection (DENV) is an endemic disease in tropical and subtropical regions caused by dengue virus that is transmitted by mosquitos of *Aedes aegypti* and *Aedes albopictus*. Currently, there is no effective treatment to overcome dengue infection. As alternative, a new approach of drug is needed by targeting inhibition of enzyme activity that responsible for viral replication. In this research examined synthetic gallic acid and its six derivatives (benzyl-, propyl, diallyl-, allyl-, ethyl-, and salicyl gallate) through in vitro in Huh7it-1 with DENV2 and in silico with protein-ligand docking against 251 sequences NS5 in GenBank. Salicyl gallate was the best candidate in in vitro analysis (IC50: 12,18 μg/ mL, CC50: 259,35 μg/ mL, SI: 21,30) and in in silico analysis (S: -16,739 kkal/ mol, pKi 3,344 μM). Propyl- and ethyl gallate were showed potential in in vitro (for propyl gallate, IC50: 13,19 μg/ mL, CC50: 241,85 μg/ mL, SI: 18,33; for ethyl gallate, IC50: 14,39 μg/ mL, CC50: 185,60 μg/ mL, SI: 7,24), however showed lowest scoring in in silico (for propyl gallate, S score: -11,908 kkal/mol, pKi 5,771μM; for ethyl gallate, S score: -5,513 kkal/mol, pKi 4,974μM). Using docking, each of potential gallic acid types above was able to bind to GLU715, LYS668, ASN701, THR584; ARG472,

ASP663, ARG207; dan LYS139, ARG207. Overall, derivatives gallic acid modified was showed better result rather than original compound