

Analisis in silico derivat-derivat sakarin bertarget enzim isoleucyl tRNA synthetase, DNA gyrase dan dihidrofolat reduktase menggunakan autodock dan vina = In silico analysis of saccharin derivates on target isoleucyl tRNA synthetase, DNA gyrase and dihydrofolate reductase enzyme with autodock and vina

Kevin Dio Naldo, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20459047&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Penemuan antibakteri sangat diperlukan mengingat resistensi bakteri dan adanya efek samping yang tidak dikehendaki. Sementara, sakarin yang dikenal sebagai pemanis sintetis memiliki potensi menjadi kandidat obat baru dikarenakan telah diketahui memiliki banyak aktivitas farmakologi, memungkinkan derivatisasi serta didukung dengan ketersediaannya yang berlimpah dan ekonomis. Pada penelitian ini, dilakukan pengujian in silico secara penambatan molekuler 40 senyawa derivat sakarin terhadap enzim isoleucyl-tRNA synthetase yang bekerja pada ribosom bakteri untuk sintesis protein, DNA gyrase bekerja dengan membuat struktur DNA bakteri lebih stabil selama replikasi dan transkripsi serta dihidrofolat reduktase yang bertanggung jawab dalam pembentukan asam tetrahidrofolat untuk sintesis DNA bakteri. Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan 5 besar senyawa terbaik hasil penambatan terhadap ketiga enzim serta mendapatkan situs pengikatan inhibisinya. Penambatan molekuler dilakukan dengan peranti lunak Autodock4 dan Vina. Pemilihan jenis bakteri disesuaikan dengan uji antibiotik standar yakni Staphylococcus aureus yang merupakan indikator bakteri Gram positif, Escherichia coli merupakan indikator bakteri Gram negatif dan Mycobacterium tuberculosis yang tidak termasuk keduanya. Dari hasil penambatan molekuler didapatkan 5 senyawa yang memiliki aktivitas inhibisi terbaik secara in silico setiap enzim menggunakan parameter Autodock4 maupun Vina. 5 senyawa ini kemudian divisualisasi untuk melihat interaksi kompleks ligan-enzim.

<hr>

ABSTRACT

Antibacterial discovery is important because of antibacterial resistance and side effect. In other side, saccharin well known as artificial sweetener has potential to become a novel drug candidate because saccharin have many pharmacological activities, possible to derivatitation, cheap and abundant availability. In this study, we employed in silico docking of 40 saccharin derivatives for determine inhibition activity of isoleucyl tRNA synthetase that work on the bacterial ribosome for protein synthesis DNA gyrase, work by making bacterial DNA structures more stable during replication and transcription and dihydrofolate reductase, responsible for the formation of tetrahydrofolic acid for bacterial DNA synthesis. The research aim to determine 5 best compound from molecular docking results and determine the active site inhibition. Molecular docking has been doing with AutoDock4 and Vina. The selection of bacteria species was adjusted with standard antibiotic test, Staphylococcus aureus which indicator of Gram positive bacteria, Escherichia coli which indicator of Gram negative bacteria and Mycobacterium tuberculosis which not belong both. From the result of molecular docking, 5 compounds was the best inhibition in silico activity in every enzyme using AutoDock4 and Vina. The 5 compounds were then visualized to look ligand enzyme complex

interactions.