

Penapisan virtual senyawa dari pangkalan data tanaman herbal Indonesia sebagai antagonis ADP P2Y12 = Virtual screening of Indonesian herbal database as ADP P2Y12 antagonist

Marwan Fikri Arsyad, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20459193&lokasi=lokal>

Abstrak

Penyakit kardiovaskular adalah salah satu penyebab kematian yang banyak di dunia saat ini. Salah satu penyebab penyakit kardiovaskular adalah trombosis arterial yang bisa disebabkan oleh agregasi platelet yang menutup arteri. Salah satu faktor penting dalam agregasi platelet adalah aktivasi platelet oleh ADP dengan reseptor P2Y 12. Penelitian ini dilakukan untuk mencari kandidat inhibitor ADP P2Y 12 yang berasal dari tanaman herbal Indonesia menggunakan AutoDock dan AutoDock Vina. 96 senyawa yang terbukti memiliki aktivitas inhibisi terhadap ADP P2Y12 digunakan sebagai kontrol positif dan digunakan untuk membuat pengecoh pada DUD-E dengan mengunggah kontrol positif ke laman DUD-E. Penapisan yang dilakukan mendapatkan satu senyawa aktif yang berpotensi sebagai inhibitor P2Y 12 yaitu Roxburghine B yang berikatan pada residu asam amino yang penting Lys280 dan Arg256.

.....

Cardiovascular disease is one of the leading causes of death in the world. One of the causes of cardiovascular disease is artherial thrombosis that can be caused by platelet agregation that is covered in arteries. One of important factor in platelet agregation is platelet activation by ADP receptors, P2Y 12. This research was conducted to find candidate inhibitor of P2Y 12 from Indonesian herbal plants database using AutoDock and AutoDock Vina. Ninety six compounds known for their inhibitory activity against P2Y 12 were used as actives and as reference for generating decoys on DUD E by upload positive control to DUD E website. The virtual screening yields one potential P2Y 12 inhibitor. Roxburghine B binds to important amino acid residues of Lys280 and Arg256.