

Analisis in silico senyawa glikosida flavonoid dan aglikonnya sebagai inhibitor transkriptase balik HIV-1 = In silico analysis of flavonoid glycosides and its aglycones as HIV-1 reverse transcriptase inhibitor

Stefandi J. Wijaya, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20474683&lokasi=lokal>

Abstrak

Transkriptase balik HIV-1 merupakan salah satu enzim virus HIV yang sangat vital untuk reproduksi virus. Pertumbuhan virus HIV dapat berkurang secara signifikan apabila fungsi enzim tersebut terhambat. Saat ini, pengobatan HIV telah banyak diterapkan, tetapi pengobatan yang lebih efektif selalu dibutuhkan karena kemungkinan resisten yang terjadi dan efek samping dari penggunaan regimen obat dalam jangka panjang. Pencarian dilakukan dari sumber-sumber alam yang memiliki potensi sebagai obat. Berdasarkan penelitian sebelumnya, terdapat beberapa senyawa alam yang memiliki afinitas tinggi terhadap enzim transkriptase balik HIV-1 dan beberapa dari senyawa tersebut merupakan glikosida flavonoid. Oleh karena itu, untuk mempelajari lebih lanjut tentang glikosida flavonoid, khususnya pengaruh gugus glikon dalam interaksi dengan enzim transkriptase balik HIV-1, dilakukan analisis in silico senyawa glikosida flavonoid terhadap enzim transkriptase balik HIV-1 dengan metode penambatan menggunakan parameter AutoDock. Dari hasil penambatan, senyawa glikosida flavonoid terbaik yang direkomendasikan ialah yang memiliki energi ikatan bebas dengan nilai rendah, yaitu kaempferol-3-O-rhamnosida, mirisetin-3-O-rhamnosida, dan kuersetin 3-O-rhamnosida. Ketiga senyawa ini memiliki nilai energi ikatan bebas yang baik karena berinteraksi dengan asam amino kunci Tyr181 serta memiliki interaksi atau ikatan dengan asam amino lain yang tersebar pada tiga cincin flavonoid dan juga pada gugus gula. Gugus glikon pada glikosida flavonoid terlihat memberikan pengaruh dalam interaksi dengan enzim transkriptase balik HIV-1.

.....

HIV 1 reverse transcriptase is one of HIV's vital enzymes for virus reproduction. The multiplication of the virus can be significantly decreased if this enzyme is inhibited. There are currently a lot of treatments for HIV, but a more effective treatment is always needed because of the possibility of drug resistance and its side effects for a long term use. The search is done from natural sources that have potential as a medicine. Based on previous study, there are some natural compounds with high affinity to the HIV 1 reverse transcriptase enzyme and some of these compounds are flavonoid glycosides. Therefore, to learn more about flavonoid glycosides, especially the effect of the glycone group in its interaction with the HIV 1 reverse transcriptase, an in silico analysis is done by using docking method with AutoDock parameters. The results showed that the most recommended flavonoid glycosides are those with the lowest binding energy, which were kaempferol 3 O rhamnoside, myricetin 3 O rhamnoside, and quercetin 3 O rhamnoside. This is suggested because of their interaction with the key amino acid Tyr181 and also the interaction with other amino acids that spread on all three flavonoid rings and also on sugar group. The glycone groups of flavonoid glycosides appear to have an effect in the interaction with HIV 1 reverse transcriptase enzyme.