

Penemuan inhibitor BCR-ABL terbaru menggunakan penapisan virtual berbasis farmakofor dan simulasi dinamika molekul dalam terapi obat leukemia = Discovery of a novel BCR-ABL inhibitor using pharmacophore based virtual screening and molecular dynamics simulation in leukemia drug therapy

M. Chandra Haikal, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20475253&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Leukemia merupakan salah satu jenis kanker dengan jumlah kematian yang cukup tinggi. Salah satu jenis dari leukemia adalah chronic myeloid leukemia CML . Penyakit ini dapat dideteksi dengan kehadiran gen BCR-ABL. Protein ini yang menyebabkan fosforilasi beberapa molekul sehingga dapat mengakibatkan CML. Oleh sebab itu, protein ini dapat dijadikan sebagai target penting dalam penemuan obat untuk leukemia, khususnya jenis CML. Metode yang digunakan pada penelitian secara in silico ini adalah metode penapisan virtual berbasis farmakofor pharmacophore-based virtual screening dan Protein-Ligan Interaction Fingerprint PLIF . Senyawa inhibitor yang digunakan adalah senyawa in vitro yang diunduh dari pangkalan data ZINC15. Penelitian ini akan melakukan penambatan molekul molecular docking terhadap inhibitor pada sisi aktif protein target. Selanjutnya, senyawa inhibitor terbaik akan dilakukan uji farmakologi dan uji efek kesehatan untuk dapat dijadikan sebagai kandidat obat. Hasil dari penelitian ini didapatkan 3 ligan senyawa in vitro yang dapat dijadikan kandidat obat terbaik untuk menghambat gen BCR-ABL pada protein ABL1 Kinase.

<hr>

ABSTRACT

Leukemia is one type of cancer with high number of deaths. Chronic myeloid leukemia CML is one type of leukemia. BCR ABL is a gene that can be a biomarker for this disease. This protein causes the phosphorylation of some molecules that cause CML. Therefore, this protein can be an important target in the discovery of drugs for leukemia, especially CML. Pharmacophore based virtual screening and Protein Ligand Interaction Fingerprint PLIF is the method that we used in this research. We downloaded the inhibitor from ZINC15 database and then we do a molecular docking simulation to know the protein ligand interaction. In the last step, we do a pharmacological properties test and health effects get to be used as drug candidates. The results of this study obtained 3 ligand of in vitro compounds that can be used as the best drug candidate to inhibit the BCR ABL gene in the ABL1 Kinase protein.