

Penapisan virtual terpenoid sebagai inhibitor protein viral 24 (VP24) ebola zaire untuk terapi penyakit ebola = Virtual screening of terpenoids as viral protein 24 (VP24) inhibitor for zaire ebola virus through pharmacophore-based drug design

Ade Hanna Natalia, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20484826&lokasi=lokal>

Abstrak

Ebola adalah virus penyebab fatal hemoragik pada manusia dan primata non-manusia. Virus ebola memiliki lima spesies dan yang paling mematikan ialah virus ebola Zaire. Genom virus ebola mengkodekan tujuh protein yang penting bagi siklus hidupnya dan penelitian ini dilakukan untuk menghambat VP24 virus ebola Zaire. VP24 memiliki potensi sebagai target obat karena memiliki peran penting dalam replikasi virus ebola dan penghambatan interferon sel inang. Dalam penelitian ini, senyawa terpenoid digunakan untuk menghambat VP24 Zaire secara komputasi dengan menggunakan fitur farmakofor. Terdapat 55.979 senyawa terpenoid diperoleh dari pangkalan data Pubchem kemudian ligan disaring berdasarkan sifat toksisitas melalui Osiris DataWarrior dan terdapat 3.353 ligan yang memiliki sifat toksisitas yang menguntungkan. Selanjutnya fitur farmakofor digunakan untuk menyaring ligan dan 1.375 ligan memiliki struktur yang sesuai dengan fitur farmakofor. Kemudian ligan dilakukan simulasi penambatan molekul dengan target protein dan terdapat 10 ligan terbaik berdasarkan sifat molekul dan interaksi molekuler. Selanjutnya, semua ligan dianalisa sifat farmakologisnya melalui Osiris DataWarrior, Toxtree, admetSAR, SwissADME, dan pkCSM. Akhirnya, terdapat tiga ligan terbaik yaitu Taxumairol V, Acrivastine, dan 3-O-acetylluncaric acid. Dalam penelitian ini, Taxumairol V adalah ligan terbaik untuk menghambat VP24 virus ebola Zaire karena ligan memiliki sifat molekul, interaksi molekuler, dan sifat farmakologis yang baik sebagai kandidat obat.

Ebola is a pathogenic virus which causes fatal hemorrhagic fever in humans and non-human primates. Ebolavirus has five species, and there is the most pathogenic of ebolavirus namely Zaire ebolavirus. Ebola virus genome encodes seven protein which important for the ebolavirus life cycle and in this research was conducted to inhibit VP24 Zaire ebolavirus. VP24 has potential as a drug target because VP24 has an essential role in replication and interferon inhibition. In this research, 55,979 terpenoid compounds were obtained from PubChem database then the ligands were screened based on toxicity properties through Osiris DataWarrior, and there were 3,353 ligands which have beneficial toxicity properties. Afterward, the pharmacophore features were used to screen all ligands and 1,375 ligands have suitable structures according to the pharmacophore features. All ligands were docked with the protein target, and there were ten best ligands based on the molecular properties and interactions. Furthermore all ligands were investigated their pharmacological properties through Osiris DataWarrior, Toxtree, admetSAR, SwissADME, and pkCSM. Finally, there were three best ligands namely, Taxumairol V, Acrivastine, and 3-O-acetylluncaric acid. In this study, Taxumairol V was the best ligand to inhibit VP24 Zaire ebolavirus because the ligand has good molecular interactions, molecular and pharmacological properties.