

Penapisan virtual berbasis simulasi molecular docking pada senyawa bahan alam Indonesia sebagai inhibitor protein HSP70 untuk terapi virus ebola = Virtual screening based on molecular docking simulation on Indonesian natural material compounds as HSP70 protein inhibitors for ebola virus therapy

Mochammad Faisal, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20494892&lokasi=lokal>

Abstrak

Virus Ebola adalah salah satu penyakit paling mematikan di dunia, dengan hampir 29.000 kasus melaporkan dan membunuh 11.000 dari mereka, tetapi tidak ada perawatan atau vaksin yang dapat melawan penyakit ini secara efektif. Penyakit ini disebabkan oleh virus ebola (EBOV), anggota utama dari keluarga Filoviridae. Siklus hidup virus ini telah dioperasikan oleh beberapa mayor protein, salah satunya adalah protein HSP70, yang telah dikenal penting peran dalam transkripsi dan replikasi EBOV. Karena itu, targetkan protein HSP70 dapat menjadi solusi untuk mengobati penyakit patogen ini. Dalam penelitian ini, skrining virtual Produk alami Indonesia dilakukan sebagai inhibitor HSP70 EBOV. Molekuler simulasi docking dilakukan untuk menguji interaksi dan afinitas ligan obligasi dengan protein HSP70 EBOV; simulasi ini dilakukan dengan menggunakan MOE 2014.09 perangkat lunak. Hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa penghambatan HSP70 berkurang secara signifikan Replikasi EBOV dengan menggunakan ligan senyawa bahan alami Indonesia. Itu nilai bioavailabilitas diperoleh sebesar 0,56. Ini menunjukkan bahwa obat tersebut dapat digunakan secara oral.

<hr>

The Ebola virus is one of the deadliest diseases in the world, with nearly 29,000 cases reporting and killing 11,000 of them, but there is no treatment or vaccine that can fight this disease effectively. This disease is caused by the Ebola virus (EBOV), a major member of the Filoviridae family. The life cycle of this virus has been operated by several major proteins, one of which is the HSP70 protein, which has been recognized for an important role in the transcription and replication of EBOV. Therefore, targeting the HSP70 protein can be a solution to treat this pathogenic disease. In this study, virtual screening of Indonesian natural products was carried out as an EBP HSP70 inhibitor. Molecular docking simulation was carried out to test the interaction and affinity of bond ligands with the EBP HSP70 protein; This simulation was carried out using MOE 2014.09 software. The results obtained showed that HSP70 inhibition was significantly reduced by EBOV replication using ligands of Indonesian natural compounds. The bioavailability value was obtained at 0.56. This shows that the drug can be used orally.