

Pemodelan Dinamika Molekuler Ligan Hesperetin, Hesperidin, dan Naringenin terhadap Target Polimerasi Virus Dengue Serotype 3 = Molecular Dynamics Modeling Chemical Structure of Hesperetin, Hesperidin, and Naringenin against Polymerase of Dengue Virus Serotype 3

Raihan Kenji Rizqillah, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20515513&lokasi=lokal>

Abstrak

Demam berdarah merupakan penyakit yang disebarkan melalui virus DEN-V dengan perantara nyamuk. Penyakit ini berbahaya karena belum ada obat, vaksin, ataupun antiviral khusus terhadap virus DEN-V, sehingga perlu dilakukan penemuan obat untuk demam berdarah. Enzim RNA dependent RNA polymerase (Rdrp) pada DEN-V dapat dijadikan target obat karena berperan penting pada proses replikasi virus. Pada penelitian ini dilakukan simulasi *in silico* terhadap tiga senyawa bioflavonoid, sub-kelas flavanon, yaitu Hesperetin, Hesperidin, dan Naringenin. Simulasi penambatan molekuler dan dinamika molekuler dilakukan untuk mengetahui kebolehhadian senyawa tersebut sebagai inhibitor target Rdrp. Hasil simulasi senyawa flavanon dibandingkan dengan Quercetin, dengan parameter penilaian penambatan molekuler, energi ikatan, RMSD, RMSF, dan kontak ligan-target. Hasil nilai penambatan molekuler untuk masing-masing ligan terendah yaitu Hesperidin, Quercetin, Hesperetin, dan Naringenin dengan nilai berturut-turut yaitu -9,842 kcal/mol, -8,513 kcal/mol, -7,761 kcal/mol, dan -5,634 kcal/mol. Hasil MM-GBSA energi ikatan terbaik adalah ligan Hesperidin, Naringenin, Hesperetin, dan Quercetin dengan nilai ikatan energi bebas secara berturut-turut yaitu -69,31 kcal/mol, -64,90 kcal/mol, -60,93 kcal/mol, dan -57,83 kcal/mol. Hasil dari studi ini memprediksi bahwa Hesperidin dapat menjadi inhibitor terhadap target Rdrp yang lebih baik dibandingkan Quercetin, sementara Hesperetin dan Naringenin juga memiliki aktivitas inhibisi tetapi tidak sebaik Quercetin.

.....Dengue fever is a disease spread by the DEN-V virus through mosquitoes. This disease is dangerous because there is no specific drug, vaccine, or antiviral against the DEN-V virus, insisting the need of drug discovery for dengue fever. RNA dependent RNA polymerase (Rdrp) enzyme in DEN-V can be a drug target because it has an important role in the virus replication process. In this research, *in silico* simulations were carried out on bioflavonoid compounds, flavanone sub-class, namely Hesperetin, Hesperidin, and Naringenin. Molecular docking simulations and molecular dynamics were carried out to determine the probability of these compounds to be inhibitors of Rdrp targets. The results obtained from the simulation of the flavanones was compared with quercetin, which are docking score, energy binding, RMSD, RMSF, and ligand-target contact. The molecular docking results, docking score, for each of all ligands from the lowest were Hesperidin, Quercetin, Hesperetin, and Naringenin with values of -9.842 kcal/mol, -8.513 kcal/mol, -7.761 kcal/mol, and -5.634 kcal/mol, respectively. The best bond energy MM-GBSA results were Hesperidin, Naringenin, Hesperetin, and Quercetin with the value of free energy bonding respectively, namely -69.31 kcal/mol, -64.90 kcal/mol, -60.93 kcal/mol, and -57.83 kcal/mol. The results of this study predict that Hesperidin can be a better inhibitor to target Rdrp than Quercetin, while Hesperetin and Naringenin also have inhibitory activity but not as well as Quercetin.