

Studi Inhibisi Senyawa Bahan Alam dan Modifikasinya menjadi Senyawa Organoboron Sebagai Inhibitor α -Glucosidase I dan II untuk Pengobatan Dengue secara In Silico = In Silico Study of Natural Products and Its Modification to Organoboron Molecules as α -Glucosidase I and II Inhibitors for Dengue Therapeutic

Windraseptamadya Asrah, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920522626&lokasi=lokal>

Abstrak

Demam dengue adalah salah satu jenis demam yang umum terdapat pada negara beriklim tropis. Demam ini disebabkan oleh virus dengue (DENV) yang disebarkan oleh nyamuk *Aedes aegypti* atau *Aedes albopictus* yang umumnya bereproduksi di iklim tropis serta dapat berubah menjadi demam berdarah dengue (DBD) apabila penderita tidak dirawat dengan tepat yang dapat berakibat fatal. DENV melakukan replikasi di dalam retikulum endoplasma dari sel manusia dengan bantuan enzim α -Glucosidase yang dapat diinhibisi dengan menggunakan senyawa berbasis iminosakarida yang mengakibatkan DENV mengalami misfold dan terdegradasi. Ligan standar dan modifikasi telah dilakukan studi ADMET dan RO5 sebelum dilakukan docking dengan protein. Ligan modifikasi tersebut adalah senyawa organoboron yang berbasis terhadap 1-deoxynojirimycin yang meningkatkan energi ikatan bebas pada kompleks protein-ligan yang terbentuk jika dibandingkan dengan senyawa yang tidak termodifikasi. Dari sepuluh ligan modifikasi, ligan nomor dua dan tiga memiliki interaksi terbaik dengan α -Glucosidase I dan II secara berturut-turut dengan sebesar -8,622 kkal/mol dan -8,858 kkal/mol secara berturut-turut.

.....Dengue fever is a type of fever that is commonly found in tropical countries. It is caused by dengue virus (DENV) that transmitted by *Aedes aegypti* or *Aedes albopictus* mosquitos that mostly reproduces in tropical climates, that can develop into more severe and fatal disease called dengue hemorrhagic fever. DENV can replicate inside endoplasmic reticulum of human cells with the help of α -Glucosidase enzymes, which can be inhibited using iminosaccharide based drug, that could lead to DENV degradation due to misfolded protein. Standard and modified ligand underwent ADMET and RO5 analysis before being prepared alongside with protein to be docked. The modified ligand is an organoboron compound based on 1-deoxynojirimycin that increases binding free energy on formed ligand-protein complex compared to non-modified compound. From ten modified ligands, ligand number two and three had the best interaction with α -Glucosidase I and II respectively with of -8.622 kcal/mol and -8.858 kcal/mol respectively.