

Penapisan virtual basis data senyawa tanaman obat di Indonesia sebagai inhibitor enzim-enzim hiv-1 = Virtual screening of Indonesian herbal database as hiv-1 enzymes inhibitors = Virtual screening of Indonesian herbal database as hiv-1 enzymes inhibitors

Rezi Riadhi Syahdi, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20300131&lokasi=lokal>

Abstrak

HIV-1 (Human immunodeficiency virus tipe 1) adalah anggota famili retrovirus yang dapat menyebabkan penyakit AIDS ketika menginfeksi manusia. Epidemii AIDS adalah salah satu penyakit yang paling destruktif di zaman modern. Diperkirakan lebih dari 33 juta orang telah terinfeksi hingga tahun 2010.

Berbagai penelitian perancangan obat yang mentarget berbagai enzim virus HIV terus dilakukan terutama enzim vital untuk reproduksi virus seperti transkriptase balik, integrase, dan protease. Penapisan virtual sebagai salah satu metode pendekatan in silico telah digunakan pada pencarian senyawa penuntun dari basis data senyawa library ataupun dari basis data bahan alam sebagai inhibitor HIV-1.

Pada penelitian ini dilakukan penapisan virtual basis data senyawa tanaman obat di Indonesia pada transkriptase balik, integrase dan protease HIV-1. Penapisan dilakukan menggunakan piranti lunak GOLD, AutoDock dan AutoDock Vina.

Berdasarkan hasil penapisan didapatkan 10 peringkat senyawa terbaik dari tiap metode untuk tiap enzim. Metode penapisan yang relatif lebih akurat adalah AutoDock untuk transkriptase balik; AutoDock Vina dan GOLD untuk protease; serta AutoDock Vina untuk integrase.

.....

HIV-1 (Human immunodeficiency virus type 1) is a member of retrovirus family that could infect human and causing AIDS disease. AIDS epidemic is one of the most destructive diseases in the modern era. There were more than 33 million people infected by HIV until 2010.

Various researches have been done to design drug that targeting HIV enzymes primarily vital reproduction enzymes such as reverse transcriptase, integrase and protease. Virtual screening as in silico approach has been used to find lead molecules from compound library or natural database as HIV-1 inhibitors.

In this research, virtual screening of Indonesian herbal database was done to reverse transcriptase, integrase and HIV-1 protease. Virtual screening was done using GOLD, AutoDock, and AutoDock Vina.

Based on this research, top ten ranked compound was obtained for each methods and enzymes. Virtual screening method which relatively more accurate is AutoDock for reverse transcriptase; AutoDock Vina and GOLD for protease; and AutoDock Vina for integrase.