

Penapisan Virtual Senyawa Peptida Terkonjugasi CPP Sebagai Inhibitor Protein QcrB BCC basil Mycobacterium Tuberculosis = Virtual Screening of CPP Conjugated Peptide As QcrB BCC Protein Inhibitors of Mycobacterium Tuberculosis Bacteria

Muhammad Ihsan Muttaqin, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920541096&lokasi=lokal>

Abstrak

Tuberkulosis adalah penyebab utama kematian global tepat di bawah COVID-19 dan peringkat di atas HIV. Penyakit ini disebabkan oleh patogen yang disebut Mycobacterium tuberculosis yang menyebar dengan mudah melalui udara dan diketahui tetap laten di tubuh kebanyakan orang, yaitu sekitar seperempat dari populasi dunia. Masalah TB saat ini juga mencakup dua perhatian utama, vaksin resmi tidak benar-benar efektif, dan bakteri terus menjadi resisten terhadap obat. Dalam penelitian ini, kami mengusulkan strategi untuk membuat obat baru yang didesain untuk melewati resistensi tersebut dengan mensimulasikannya melalui metode *in silico* yang dijalankan melalui penambatan molekul, simulasi dinamis, dan prediksi farmakologi. Kami mengusulkan lima obat (peptida) yang kemudian dikonjugasikan dengan peptida penembus sel (CPP) yang dikenal akan kekuatannya, dengan protein QcrB sebagai reseptor. Kandidat tersebut ialah Noopept, Glycyl-L-Proline, Leuteonosticon, Alaptide, dan NNZ-2591. Semua kandidat dipilih mengikuti Ro5 Lipinski serta merujuk pada ADME dan Toksisitas.

.....Tuberculosis is a global leading cause of death, just below COVID-19 and ranked above HIV. This disease is caused by a pathogen called Mycobacterium tuberculosis which spreads easily through the air and is known to remain latent in most people's bodies, about a quarter of the world's population. The current problems with TB also include two main concerns: the official vaccine is ineffective, and the bacteria keeps gaining resistance to drugs. In this research, we proposed a strategy to create a new drug to pass this resistance by simulating it through *in silico* methods by running molecular docking, dynamic simulation, and pharmacological prediction. We proposed five drugs (peptides) that were then conjugated with a cell-penetrating peptide (CPP) known for its transference prowess, with QcrB protein as the receptor. Those candidates are Noopept, Glycyl-L-Proline, Leuteonosticon, Alaptide, and NNZ-2591. All candidates were picked following Lipinski's Ro5 along with ADME and Toxicity.