

Virtual screening senyawa dari pangkalan data tanaman obat Indonesia sebagai inhibitor enzim Plasmodium falciparum Enoyl Acyl carrier protein reductase (PfENR) menggunakan autodock dan autodock vina = Virtual screening of Indonesian herbal database as Plasmodium falciparum Enoyl Acyl carrier protein reductase (PfENR) enzyme inhibitor with autodock and autodock vina

Manurung, Raja Putra Klaudius, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20346435&lokasi=lokal>

---

Abstrak

Malaria menjadi masalah kesehatan global utama karena banyaknya kejadian resistensi obat, sedangkan ketersediaan obat yang efektif juga terbatas, sehingga mendasari pentingnya pengembangan obat antimalaria yang baru. Berbagai penelitian perancangan obat yang menarget berbagai enzim terus dilakukan, terutama enzim Plasmodium falciparum Enoyl Acyl Carrier Protein Reductase (PfENR). Penapisan virtual sebagai salah satu metode pendekatan in silico telah digunakan pada pencarian senyawa penuntun dari basis data senyawa ataupun dari basis data bahan alam sebagai inhibitor PfENR. Pada penelitian ini dilakukan penapisan virtual basis data senyawa tanaman obat di Indonesia pada PfENR. Penapisan dilakukan dengan menggunakan piranti lunak AutoDock dan AutoDock Vina. Pada AutoDock Vina dilakukan validasi terlebih dahulu sedangkan pada AutoDock tidak dilakukan karena telah divalidasi oleh peneliti sebelumnya. Hasil validasi AutoDock Vina diperoleh grid box terbaik yaitu 80x80x80. Berdasarkan hasil penapisan diperoleh 10 peringkat senyawa terbaik dari tiap metode dan 5 senyawa irisan dari kedua metode yaitu jacoumaric acid, beta sitosterol glucoside (lyoniside), limacine, leucadenone B, dan yuehchukene.

*Malaria is a major global public health problem. The alarming spread of its drug resistance and limited number of effective drugs available underline how important it is to discover new antimalarial drug. Various researches have been done to design drug targeting Plasmodium falciparum Enoyl Acyl Carrier Protein Reductase (PfENR) enzymes. Virtual screening as in silico approach has been used to find lead molecules from compound library or natural database as PfENR inhibitors. In this research, virtual screening of Indonesian herbal database was done to PfENR. Virtual screening was done using AutoDock and AutoDock Vina. AutoDock Vina was validated beforehand in order to obtain the best grid box while the virtual screening using AutoDock is not validated because it has been validated by previous researchers. Based on this research, the best grid box for AutoDock Vina is 80x80x80. Top ten ranked compounds were obtained for each method and five the same compound of the two methods that was jacoumaric acid, beta sitosterol glucoside (lyoniside), limacine, leucadenone B, and yuehchukene.*