

Analisis dinamika molekuler hasil penambatan molekuler kompleks alfa glukosidase dengan sepuluh senyawa kimia tanaman hasil virtual screening dari basis data herbal = Molecular dynamics s analysis of docking product of alpha glucosides with ten organics compound from virtual screening of herbal database

Simanjuntak, Ribka Martina, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20412165&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Kanker adalah suatu kondisi yang ditandai dengan adanya pertumbuhan abnormal dari sel-sel tubuh yang tidak terkontrol dan mampu mempengaruhi sel normal lainnya. Saat ini banyak dilakukan penelitian untuk mencari senyawa-senyawa baru yang berpotensi sebagai antikanker. Salah satu cara yang digunakan untuk mendukung analisis ini adalah dengan metode in silico. Selain itu, metode ini juga mendukung green chemistry yang cukup diminati akhir-akhir ini. Dalam penelitian ini, diteliti sepuluh senyawa dari basis data herbal hasil Virtual Screening yang memiliki aktivitas sebagai inhibitor enzim α-Glukosidase manusia. Model tiga dimensi (3D) enzim dikonstruksi berdasarkan struktur kristal α-glukosidase S. solphataricus (MalA) dan sub-unit N-terminal Maltase Glukoamilase manusia (NtMGAM). Penambatan sepuluh senyawa yang akan diuji; yakni 6-Deoxoteasterone, Diosgenin, Withangulatin A, Withanolide, Lanosterol, Cassiamin C, Asiatic Acid, Isoarborinol, Yamogenin, dan Lantic Acid, ditambatkan menggunakan AutoDock 4.2 dan hasilnya menunjukkan nilai ΔG secara berturut-turut yakni -9,09; -8,76; -8,73; -8,66; -8,65; -8,65; -8,64; -8,59; -8,48; dan -8,45 kkal/mol. Analisis kemudian dilanjutkan dengan melakukan simulasi dinamika molekuler selama 2 nanodetik menggunakan Amber 11. Sebagai kontrol positif, digunakan senyawa Castanospermine dan 1,6-Epi-Cyclophellitol. Hasil analisis menunjukkan bahwa secara umum, pada kompleks senyawa ligan dan makromolekul ada interaksi yang kuat dan stabil pada residu Asp587, Asp511, Asp 398, Trp 274, dan Phe 620.

<hr><i>ABSTRACT</i>

Cancer is a condition that characterized by the abnormal growth of cells that are not controlled and capable to affect normal cells. Nowadays, there's a lot of research to find new compounds that have the potential as an anticancer. One of the ways to support this analysis is the in silico. In addition, this method also supports green chemistry that considerable interest lately. This study will investigated ten compounds from Herbal Database that have been researched before through Virtual Screening, that have the activity as an inhibitor of α-glucosidase. Three-dimensional (3D)'s model was constructed by the crystal structure of the enzyme α-glucosidase S. solphataricus (mala) and sub-units of N-terminal human maltase Glucoamylase (NtMGAM). 6-Deoxoteasterone, Diosgenin, Withangulatin A, Withanolide, lanosterol, Cassiamin C, Asiatic Acid, Isoarborinol, Yamogenin, and Lantic Acid was tethered using Autodock 4.2 and the results show the value of ΔG are -9.09; -8.76; -8.73; -8.66; -8.65; -8.65; -8.64; -8.59; -8.48; and -8.45 kcal/mol. The analysis then continued by performing simulation on mollecular dynamics for 2 nanoseconds using Amber 11. Castanospermine and 1,6-Epi-Cyclophellitol was used as the positive control. The analysis showed that in general the complex of ligand and macromolecule, that there is a strong and stable interaction at residues Asp587, Asp511, Asp 398, Trp 274 and Phe 620.</i>