

Penapisan virtual dengan metode penambatan molekul dari basis data senyawa herbal sebagai aktivator sirtuin 1 = Virtual screening of Indonesian herbal database as sirtuin1 activator using docking method

Olivia Aldisa, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20431395&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Senyawa kimia yang terkandung di dalam tanaman memiliki manfaat dan khasiat yang dapat berguna bagi kesehatan masyarakat. Banyak penelitian dalam bidang biokimia dan kimia medisinal yang bertujuan untuk menemukan obat yang tepat bagi berbagai penyakit yang sangat berbahaya misalnya kanker, penyakit kardiovaskuler, dan diabetes mellitus. Di dalam tubuh manusia terdapat protein yang merupakan kunci sensor metabolik dalam berbagai jaringan metabolisme yaitu Sirtuin1 (SIRT1). Saat ini, hanya resveratrol, fisetin dan quercetin merupakan senyawa dari bahan alam yang telah teruji sebagai aktivator SIRT1, padahal sangat banyak senyawa kimia dari tanaman yang berpotensi menjadi aktivator SIRT1. Terdapat empat bentuk kristal SIRT1 yang bertindak sebagai aktivator yaitu 4ZZH, 4ZZI, 4ZZJ, dan 5BTR. Pada penelitian ini, dilakukan penambatan molekuler senyawa dari basis data tanaman Indonesia yang berpotensi menjadi aktivator SIRT1. Penambatan dilakukan menggunakan piranti lunak AutoDock Vina. Pada AutoDock Vina dilakukan validasi terlebih dahulu, hasil validasi AutoDock Vina diperoleh grid box terbaik yaitu 60x60x60. Berdasarkan hasil penapisan diperoleh 20 peringkat senyawa terbaik dari masing-masing bentuk kristal dan 4 senyawa irisan dari keempat bentuk kristal yaitu Alpha-carotene, Cassiamin C, Casuarinin, dan Lutein.

<hr>

ABSTRACT

Chemical compounds in plants often have benefits and efficacy that can be useful for medicine. Biochemistry and medicinal chemistry research aims to innovate new medicine for degenerative human diseases such as cancer, cardiovascular diseases, and diabetes mellitus. Human have protein that are key of metabolic sensors in a variety of metabolic pathways, Sirtuin1 (SIRT1). Currently, only resveratrol, fisetin and quercetin that are compounds from natural ingredients that have been tested as an activator of SIRT1 even though there are many chemical compounds in plants that potentially can be SIRT1 activator. There are four crystal forms which act as a SIRT1 activator, 4ZZH, 4ZZI, 4ZZJ, and 5BTR. In this study, we employed docking of new molecular compounds from Indonesian herbal database as SIRT1 activator. Virtual screening was done using AutoDock Vina. AutoDock Vina was validated beforehand in order to obtain the best grid box, based on this research, the best grid box for AutoDock Vina is 60x60x60. Top ten ranked compounds were obtained for each crystal form and four the same compounds of the four crystal forms that were Alpha-carotene, Cassiamin C, Casuarinin, and Lutein.