

Penapisan virtual senyawa dari basis data tanaman herbal Indonesia sebagai aktivator procaspase-3 menggunakan autodock dan autodock vina = Virtual screening of Indonesia herbal database as procaspase-3 activator using autodock and autodock vina

Ayu Annissa, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20458559&lokasi=lokal>

Abstrak

Kanker adalah suatu penyakit dimana sel tubuh bersifat abnormal dan tumbuh secara tidak terkontrol yang bisa meluas dan menyebar ke setiap bagian di tubuh manusia. Ditemukan ekspresi berlebih procaspase-3 pada beberapa kanker yang harus diaktivasi menjadi Caspase-3 agar dapat menginduksi apoptosis pada sel. Pada penelitian ini, dilakukan penapisan virtual senyawa dari basis data tanaman herbal Indonesia sebagai aktivator Procaspase-3 menggunakan peranti lunak Autodock dan Autodock Vina. Penelitian ini divalidasi menggunakan parameter Enrichment Factor EF, Receiver Operating Characteristics ROC gunakan Autodock diperoleh sepuluh senyawa terbaik dengan energi ikatan -8,28 -9,31 kkal/mol dan menggunakan Autodock Vina diperoleh sepuluh senyawa terbaik dengan energi ikatan -8,1 -8,8 kkal/mol. Didapatkan dua senyawa yang beririsan pada kedua peranti lunak, yaitu Betulinic acid dan Maslinic acid. Betulinic acid berinteraksi dengan residu dengan Leu136A, Lys137A, Tyr195A, dan Pro201 pada Autodock dan Autodock Vina. Sedangkan Maslinic acid berinteraksi pada residu Leu136A, Lys137A, dan Pro201 pada Autodock dan Autodock Vina.

.....Cancer is a disease where body cell being abnormal and grow uncontrolled which can spread to every part of human body. Previous research found excessive expression of Procaspase 3 on cancer that must be activated to Caspase 3 in order to induce apoptotic in cells. In this research, virtual screening of Indonesian Herbal Database as Procaspase 3 activator was performed using Autodock and Autodock Vina software. This research was validated using Enrichment Factor EF, Receiver Operating Characteristics ROC, and Area Under Curve AUC parameters. Results of virtual screening using Autodock obtained the best ten compounds with binding energy 8,28 9,31 kcal mol and Autodock Vina obtained the best ten compounds with binding energy 8,1 8,8 kcal mol. Both virtual screening software showed two compounds in common, which is Betulinic Acid, and Maslinic acid. Betulinic acid interacts with residue Leu136A, Lys137A, Tyr195A, and Pro201 in Autodock and Autodock Vina. While Maslinic acid interacts with residue Leu136A, Lys137A, and Pro201 in Autodock and Autodock Vina.