

Penapisan virtual dari basis data tanaman herbal Indonesia sebagai inhibitor MDM2 = Virtual screening of Indonesian herbal database as MDM2 inhibitor

Alexander Victory, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20459052&lokasi=lokal>

Abstrak

Kanker merupakan penyakit akibat pertumbuhan tidak normal dari sel pada jaringan tubuh yang menyerang sel normal di sekitarnya. Penggunaan tanaman herbal Indonesia meningkat setiap tahunnya dalam upaya pengobatan. Penelitian terdahulu menyatakan bahwa defisiensi P53 disebabkan oleh ekspresi berlebih MDM2 sehingga peran P53 sebagai pengendali sel abnormal tidak berjalan. Pada penelitian dilakukan penapisan virtual dari basis data tanaman herbal Indonesia sebagai inhibitor MDM2 menggunakan Autodock dan Autodock Vina yang divalidasi dengan Directory of Useful Decoys-Enhanced. Validasi dilakukan dengan parameter Enrichment Factor, Receiver Operating Characteristics, dan Area Under Curve. Kesimpulan dari validasi adalah ukuran grid 70x70x70 pada Autodock yang memiliki nilai AUC 0,72, sedangkan pada Autodock Vina 0,43. Autodock Vina tidak memenuhi parameter tetapi dilakukan penapisan untuk perbandingan dengan Autodock. Diperoleh 10 senyawa peringkat teratas dengan Autodock yaitu Nimolicinol, Jacoumaric acid, Isoarborinol, Lantic acid, Diosgenin, Theasaponin E1, Taraxasterol, Leucadenone C, Simiarenol, Alpha-Amyrin. ΔG -8,83 - 9,65 kkal/mol . Diperoleh 10 senyawa peringkat teratas dengan Autodock Vina yaitu Yuehchukene, Morusin, Cyanidin, Leucadenone C, Roxburghine-B, Ocidentoside, Beta-sitosterol, Curine, Withangulatin, Jacoumaric acid. ΔG -8,7 -9,4 kkal/mol . Jacoumaric acid dan Leucadenone C memberikan hasil penapisan virtual pada kedua piranti lunak dan berinteraksi pada daerah aktif MDM2 yaitu residu Leu54, Ile61, Met62, dan Ile99.

.....

Cancer is a disease caused by abnormal cells growth that can attack normal cells around it. The use of Indonesian herbal increases for treatment. Past researches declare that P53 deficiency is caused by MDM2 overexpression so the role P53 as a cell regulator does not work. In this research, virtual screening of Indonesian herbal database as MDM2 inhibitor using Autodock and Autodock Vina and validated with Directory of Useful Decoy Enhanced. Validation parameter done with Enrichment Factor, Receiver Operating Characteristics, and Area Under Curve. The conclusion of validation is grid box 70x70x70 on Autodock with AUC value 0,72, while in Autodock Vina 0,43. Autodock Vina is not fulfill the parameter standar but still screned for comparasion. Based on the virtual screening result, top ten compounds from Autodock are Nimolicinol, Jacoumaric acid, Isoarborinol, Lantic acid, Diosgenin, Theasaponin E1, Taraxasterol, Leucadenone C, Simiarenol, Alpha Amyrin. ΔG 8,83 9,65 kkal mol . Virtual screening result from Autodock Vina are Yuehchukene, Morusin, Cyanidin, Leucadenone C, Roxburghine B, Ocidentoside, Beta sitosterol, Curine, Withangulatin, Jacoumaric acid. ΔG 8,7 9,4 kkal mol . Jacoumaric acid and Leucadenone C give a result in both software ans interacts with the active site in MDM2 at residue Leu54, Ile61, Met62, and Ile99.