

Penapisan Virtual Senyawa dari Basis Data Tanaman Herbal Indonesia sebagai CpAM Virus Hepatitis B = Virtual Screening of Indonesia Herbal Database as CpAM of Hepatitis B Virus

Ulfa Ivonie, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20466675&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Hepatitis B adalah suatu penyakit yang disebabkan oleh virus hepatitis B. Salah satu faktor yang berpengaruh dalam pembentukan virus hepatitis B adalah core protein Cp . Sehingga Cp dapat digunakan sebagai salah satu target pengobatan hepatitis B. Pada penelitian ini dilakukan penapisan virtual senyawa dari basis data tanaman herbal Indonesia sebagai core protein allosteric modulator CpAM menggunakan peranti lunak AutoDock dan AutoDock Vina. Metode divalidasi dengan menggunakan parameter Enrichment Factor EF , Receiver Operating Characteristics ROC , dan Area Under Curve AUC . Pada penapisan menggunakan AutoDock digunakan grid box ukuran 55x55x55 dengan nilai EF10 0.7652 dan AUC 0.6709 sementara grid box ukuran 20.625x20.625x20.625 untuk penapisan menggunakan AutoDock Vina dengan nilai EF5 0.5075 dan AUC 0.7832. Sepuluh senyawa terbaik hasil penapisan virtual menggunakan AutoDock memiliki rentang DG: -11.74 -10.31 kkal/mol adalah yuehchukene, lansionic acid, stigmast-4-en-3-one, myrtillin, sanggenol O, lanosterol, erycristagallin, alpha-spinasterol, cyanidin 3-arabinoside, dan cathasterone. Sepuluh senyawa terbaik hasil penapisan virtual menggunakan AutoDock Vina memiliki rentang DG: -12.1 -10.7 kkal/mol adalah sanggenol O, cucumerin A, yuehchukene, palmarumycin CP1, dehydrocycloguanandin, myrtilin, liriodenine, myricetin 3-alpha-L-Arabinopyranoside, myricetin 3-galactoside, dan cassameridine.

<hr>

ABSTRACT

Hepatitis B is a disease caused by hepatitis B virus. One of the main factor in virus assembly is core protein Cp . Therefore Cp is suitable to use as one of therapeutic target for hepatitis B. In this study virtual screening of Indonesia herbal database as CpAM of hepatitis B virus was performed using AutoDock and AutoDock Vina software. The methode was validated by Enrichment Factor EF , Receiver Operating Characteristics ROC , and Area Under Curve AUC parameters. The grid box size used in virtual screening with AutoDock is 55x55x55 with EF10 0.7652 and AUC 0.6709 meanwhile grid box size that will be use in virtual screening using AutoDock Vina is 20.625x20.625x20.625 with EF5 0.5075 and AUC 0.7832. The best top ten compounds from virtual screening with AutoDock has DG levels 11.74 10.31 kkal mol theare yuehchukene, lansionic acid, stigmast 4 en 3 one, myrtillin, sanggenol O, lanosterol, erycristagallin, alpha spinasterol, cyanidin 3 arabinoside, dan cathasterone. The best top ten compounds from virtual screening with AutoDock Vina has DG levels 12.1 10.7 kkal mol adalah sanggenol O, cucumerin A, yuehchukene, palmarumycin CP1, dehydrocycloguanandin, myrtilin, liriodenine, myricetin 3 alpha L Arabinopyranoside, myricetin 3 galactoside, dan cassameridine