

Penapisan virtual senyawa dari pangkalan data tanaman obat Indonesia sebagai antagonis adenosin A2A menggunakan autoDock dan autodock vina = Virtual screening of Indonesian herbal database as adenosine A2A antagonist using autoDock and autodock vina

Nabilah Nurtika Salamah, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20474882&lokasi=lokal>

Abstrak

Beberapa penelitian menunjukkan bahwa antagonis Adenosin A2A mengurangi fluktuasi motorik, diskinesia, melindungi dari kelainan neurodegeneratif pada penyakit Parkinson di dalam otak manusia yang bersifat progresif kronis dengan hilangnya neuron dopaminergik. Tujuan dari penelitian ini adalah menemukan senyawa herbal Indonesia sebagai inhibitor Adenosin A2A dengan menggunakan metode penapisan virtual.

Pada penelitian ini, dilakukan penapisan virtual senyawa dari basis data tanaman herbal Indonesia sebagai antagonis Adenosin A2A menggunakan AutoDock dan AutoDock Vina yang divalidasi menggunakan basis data Directory of Useful Decoys: Enhanced DUD-E. Metode ini divalidasi dengan menggunakan parameter Enrichment Factor EF dan Area Under Curve AUC dengan kurva Receiver Operating Characteristics ROC. Berdasarkan hasil validasi, grid box yang digunakan untuk penapisan menggunakan AutoDock adalah grid box 60 x 60 x 60 dengan nilai EF1 sebesar 16,5869 dan AUC 0,8406. Terdapat dua senyawa Chitranone dan 3-O-Methylcalopocarpin dengan energi ikatan $-10,19$ dan $-9,55$ kkal/mol, masing-masing menunjukkan interaksi dengan situs aktif Adenosin A2A pada residu ALA63, ILE66, ALA81, LEU85, PHE168, GLU169, MET177, TRP246, LEU249, ASN253, dan ILE274. Penelitian ini menyimpulkan bahwa Chitranone dan 3-O-Methylcalopocarpin dapat diusulkan untuk dikembangkan sebagai antagonis Adenosin A2A.

.....Previous research found that Adenosine A2A antagonist allows to reduce motor fluctuations, dyskinesia, protect from neurodegenerative disorder in Parkinsons disease in the human brain which is chronic progressive of losing dopaminergic neurons. The aim of this study is to explore Indonesian herbal compounds as Adenosine A2A inhibitor using virtual screening method.

In this study, virtual screening of Indonesian herbal database as Adenosine A2A inhibitor was done by AutoDock and AutoDock Vina and was validated by database from A Directory of Useful Decoys Enhanced DUD E. The method was validated by Enrichment Factor EF and Area Under Curve AUC of Receiver Operating Characteristics ROC curve. Based on the validation results, grid box that was used in virtual screening using AutoDock is 60 x 60 x 60 with EF1 16.5869 and AUC 0.8406.

The two compounds Chitranone and 3 O Methylcalopocarpin with binding energy 10.19 and 9.55 kcal mol, respectively showing interaction with Adenosine A2A active site at residues ALA63, ILE66, ALA81, LEU85, PHE168, GLU169, MET177, TRP246, LEU249, ASN253, and ILE274. This study conclude that Chitranone and 3.O Methylcalopocarpin could be proposed to be developed as Adenosine A2A antagonist.