

Analisis prediksi parameter fisikokimia dan absorpsi obat inflammatory bowel disease secara in silico = Physicochemical and absorption parameters prediction analysis of inflammatory bowel disease drugs using in silico method

Permata Aisyah, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20474908&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Keefektifan obat oral Inflammatory Bowel Disease IBD dipengaruhi oleh sifat farmakokinetik yang meliputi proses absorpsi, distribusi, metabolisme, dan ekskresi ADME. Sifat yang akan dibahas pada penelitian ini adalah sifat farmakokinetik yaitu tentang absorpsi obat dalam tubuh. Tujuan dari penelitian ini adalah mengetahui parameter farmakokinetik yang dapat diprediksi oleh peranti lunak yang digunakan, menemukan peranti lunak yang paling baik dalam memprediksi parameter farmakokinetik obat, dan mencari korelasi antara parameter farmakokinetik yang digunakan sebagai deskriptor dengan persen absorpsi referensi. Manfaat dari penelitian ini adalah perolehan hasil analisis prediksi parameter farmakokinetik obat oral IBD berdasarkan parameter absorpsi dapat dijadikan dasar pertimbangan untuk melakukan pengembangan obat oral IBD. Penelitian ini menggunakan peranti lunak Molinspiration, QikProp, admetSAR, SwissADME, Chemicalize, pkCSM, dan Microsoft Excel. Penelitian ini menggunakan 34 senyawa obat IBD dan 8 deskriptor yang terdiri dari deskriptor dependen persen absorpsi ABS serta deskriptor independen bobot molekul BM, logP, hydrogen bond acceptor HBA, hydrogen bond donor HBD, polar surface area PSA, pKa dan Caco2 permeability yang didapatkan dari penelitian Zhao et al. 2002 dan penelitian pendahulu. BM, logP, HBA, HBD dan PSA dapat diprediksi oleh peranti lunak QikProp, SwissADME, Molinspiration, dan Chemicalize. pKa dapat diprediksi menggunakan Chemicalize. Caco2 permeability dapat diprediksi oleh peranti lunak QikProp, admetSAR, dan pkCSM. SwissADME paling akurat dalam memprediksi BM, logP, dan HBD. Chemicalize paling akurat dalam memprediksi HBA, PSA, dan pKa. admetSAR paling akurat dalam memprediksi Caco2 permeability. Nilai R paling tinggi didapat dari korelasi ABS dengan Caco2 permeability prediksi pada 34 senyawa obat dengan nilai $R = 0,8211$.

<hr>

ABSTRACT

Inflammatory Bowel Disease IBD is a chronic, idiopathic, and inflammatory bowel condition Brunton, Chabner, Knollmann, 2011 . The effectiveness of IBD drugs is affected by pharmacokinetic properties that involves absorption, distribution, metabolism, and excretion ADME. This research analyzed the absorption of drugs in the body. The purpose of this research is to know the pharmacokinetic parameters that can be predicted by the software used, to discover the best software in order to predict pharmacokinetic properties, and to analyze the correlation between pharmacokinetic parameters used as descriptor with absorption percentage from reference. The result of this research can be considered to develop IBD oral drugs. This research uses Molinspiration, QikProp, admetSAR, SwissADME, Chemicalize, pkCSM, and Microsoft Excel. This research used 34 compounds of IBD oral drugs and 7 descriptors consist of dependent descriptor absorption rate ABS and independent descriptors molecular weight MW, logP, hydrogen bond acceptor HBA, hydrogen bonding donor HBD, polar surface area PSA, pKa, and Caco2 permeability discovered from

research Zhao et al. 2002a and previous research. MW, logP, HBA, HBD and PSA can be predicted by QikProp, SwissADME, Molinspiration, and Chemicalize. pKa can be predicted using chemicalize. Caco2 permeability can be predicted by QikProp, admetSAR, and pkCSM. SwissADME is the most accurate software in predicting MW, logP, and HBD. Chemicalize is the most accurate software in predicting HBA, PSA, and pKa. admetSAR is the most accurate software in predicting Caco2 permeability. The highest R value was obtained from the correlation between ABS with Caco2 permeability on 34 drug compounds R 0.8211.