

Pembuatan basis data struktur tiga dimensi senyawa kimia dari spons di Indonesia = Establishing three dimensional structure of chemical compound of Indonesian sponges database

Retno Prihatiningtyas, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20474952&lokasi=lokal>

Abstrak

Lebih dari 20 tahun, Indonesia telah menjadi target penelitian dari senyawa bioaktif laut. Hingga saat ini, lebih dari 100 senyawa telah diisolasi dari organisme laut Indonesia seperti spons, soft coral, ascidians, alga, dan dilaporkan pada lebih dari 70 publikasi. Alkaloid, terpenoid, steroid, dan jenis senyawa bioaktif baru lainnya yang dilaporkan paling banyak berasal dari spons dan soft coral Indonesia. Di antara invertebrata laut lainnya, spons merupakan sumber terkaya bahan aktif produk farmasetika. Hal ini dikarenakan spons merupakan pembawa berbagai mikroorganisme melalui pori-pori tubuhnya sehingga ketika terjadi interaksi antara inang dan mikroorganisme simbiotiknya akan menghasilkan berbagai senyawa kimia di dalam spons. Namun, saat ini belum terdapat basis data struktur tiga dimensi senyawa kimia sebagai sumber lead compound dari organisme laut di Indonesia terutama spons yang dibutuhkan dalam pengembangan obat baru secara *in silico*, padahal spons mempunyai potensi yang besar dalam pengembangan obat baru di Indonesia yang terlihat dari peningkatan jumlah publikasi tentang penemuan-penemuan senyawa bioaktif spons dari tahun ke tahun.. Berdasarkan hal tersebut, penelitian ini bertujuan untuk memperoleh suatu basis data struktur tiga dimensi senyawa kimia dari spons di Indonesia dan memberikan rekomendasi perangkat lunak yang lebih unggul untuk pembuatan basis data tersebut. Pada penelitian ini, basis data dibuat menggunakan tiga perangkat lunak yaitu MarvinSketch, OpenBabel, dan VegaZZ, serta PyMOL untuk visualisasi struktur. Basis data terdiri dari 212 senyawa kimia dari 53 spesies spons Indonesia serta 1043 SDF, 1258 MOL, dan 2930 PDB format file struktur tiga dimensi. Struktur tiga dimensi senyawa kimia yang valid dan sesuai dengan referensi sebanyak 914 file format SDF, 916 format MOL, dan 72 format PDB. Berdasarkan visualisasi dari struktur tiga dimensi senyawa tersebut, peranti lunak yang relatif unggul untuk digunakan dalam pembuatan basis data adalah MarvinSketch dengan format file SDF atau MOL karena struktur tiga dimensi senyawa yang dihasilkan sesuai dengan literatur dan lebih sedikit terjadi kerusakan.

.....

More than 20 years, Indonesia had become a target for the research of marine bioactive compounds. In recent years, more than 100 marine bioactive compounds had been isolated from Indonesia marine organisms and reported in more than 70 publications. Alkaloids, terpenoids, steroids, and other types of new bioactive compounds were reported to be mostly derived from Indonesian sponges and soft corals. Among other marine invertebrates, sponges were the richest source of the bioactive compound of pharmaceutical products. Sponges were the feeder filter organisms that carrier of various microorganisms through the pores of their body caused the interaction between the host and the symbiotic microorganisms produced various chemical compounds. However, currently there was not the three dimensional chemical structure database as a the lead compound resources from marine organisms in Indonesia, especially sponges, needed in the drug discovery by *in silico* methods, whereas sponges had great potential in the development of new drugs in Indonesia as seen from the increase in the number of publication of the new bioactive compounds isolated from sponges. Therefore, the purpose of this study was to obtain a three dimensional structure database and

give the recommendation of preferred software for generating the three dimensional structure of chemical compounds of Indonesian sponges database. In this study, the database was established by using three software which are MarvinSketch, Open Babel, and Vega ZZ, also PyMOL for structure visualization. The database gave us a result of 212 chemical compounds from 53 Indonesian sponges species and 1043 SDF, 1258 MOL, and 2930 PDB format files of the three dimensional structure. The valid and correct three dimensional structure of chemical compound were 914 SDF format files, 916 format MOL files, and 72 PDB format files. From the three dimensional structures visualization, the database prefers established by using MarvinSketch with SDF or MOL format files since the results appropriated to literature and less of error.