

# Pemutakhiran basis data senyawa kimia dari tanaman obat di Indonesia dan penapisannya sebagai antagonis asam -amino-3-hidroksi-5-metil-4-isoksazole propionat (AMPA) = Updating chemical compound database from Indonesian herbal and its screening -amino-3-hydroxy 5-methyl-4 isoxazolepropionic acid (AMPA) antagonist

Chindy Dwi Martinah, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20475064&lokasi=lokal>

---

## Abstrak

Stroke iskemik merupakan salah satu jenis penyakit kardiovaskular yang disebabkan oleh bekuan darah yang menghalangi aliran darah ke otak. Saat iskemia, sel saraf mengalami aktivasi yang menginduksi pelepasan glutamat dalam jumlah besar sehingga terjadi stimulasi reseptor glutamat berlebihan yang akhirnya dapat terjadi eksitotoksitas. Penghambatan reseptor glutamat ionotropik, yaitu reseptor AMPA, menjadi pendekatan untuk pengobatan iskemia. Tujuan penelitian ini adalah untuk mengeksplorasi kemungkinan senyawa herbal Indonesia sebagai antagonis reseptor AMPA. Dalam penelitian ini, penapisan virtual dilakukan dengan metode penambatan menggunakan AutoDock untuk menemukan kandidat antagonis reseptor AMPA dari basis data tanaman obat Indonesia. Metode penapisan virtual divalidasi oleh area under curve AUC dari kurva ROC dan enrichment factor EF. Lipinski's Rule of Five digunakan untuk menyaring hasil skrining. Validasi hasil penapisan virtual menunjukkan bahwa AUC adalah 0,9385 dan EF 1 adalah 23,5550. Hasil skrining dari basis data tanaman obat Indonesia menunjukkan lima senyawa sanggenol O, blazeispirol X, progesterone, nimolicinol, dan boeravinone F -8,51; -8,39; -8,19; -8,17; -8,08 kkal / mol, masing-masing dan memiliki interaksi dengan residu reseptor AMPA TYR61A dan THR91A. Lima senyawa dari database herbal Indonesia sanggenol O, blazeispirol X, progesteron, nimolicinol, dan boeravinone F memiliki potensi sebagai antagonis reseptor AMPA berdasarkan metode penambatan.

.....

Ischemic stroke is one type of cardiovascular disease caused by blood clots that block blood flow to the brain. During ischemia, nerve cells undergo activation that induce large amounts of glutamate release resulting in excessive glutamate receptor stimulation which can eventually lead to excitotoxicity. Inhibition of the ionotropic glutamate receptor, i.e. the AMPA receptor, becomes approach to the treatment of ischemia. The aim of this study is to explore possibility of Indonesian herbal compound as AMPA receptor antagonist. In this study, virtual screening was performed by docking method using AutoDock to find the antagonist candidate of AMPA receptor from Indonesian herbal database. Virtual screening method was validated by area under curve AUC of ROC curve and enrichment factor EF. Lipinski's Rule of Five was used to filter the screening result. The validation of virtual screening results showed that AUC is 0.9385 and EF 1 is 23.5550. The screening result of Indonesian herbal database show top five compound sanggenol O, blazeispirol X, progesterone, nimolicinol, and boeravinone F 8.51 8.39 8.19 8.17 8.08 kcal mol, respectively and have interaction with TYR61A and THR91A residues of AMPA receptor. Five compounds of the Indonesia herbal database sanggenol O, blazeispirol X, progesterone, nimolicinol, and boeravinone F have potency as an AMPA receptor antagonist based on the docking method.