

# Optimasi dan Validasi Struktur Tiga Dimensi Senyawa Kimia untuk Pembuatan Basis Data Bahan Alam Laut Menggunakan AM1-BCC = Optimization and Validation of Three-Dimensional Structure of Chemical Compounds for the Creation of a Marine Natural Resources Database Using AM1-BCC

Dyannissa Gita Amanda, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920528138&lokasi=lokal>

---

## Abstrak

Sekitar 70% dari permukaan bumi ditutupi oleh lautan yang menyimpan sumber daya hayati yang berpotensi menjadi obat. Oleh karena itu, pengembangan obat dari bahan laut menjadi fokus penelitian di saat ini. Akan tetapi, pengembangan obat dari bahan alam laut harus menghadapi tantangan mulai dari biaya tinggi, kompleksitas molekul, keterbatasan sumber daya, dan permasalahan lingkungan. Untuk mengatasi masalah ini, penelitian *in silico* digunakan sebagai pendekatan komputasi untuk mengidentifikasi potensi senyawa obat dari bahan alam laut. Dalam penelitian *in silico*, diperlukan basis data senyawa kimia dengan struktur tiga dimensi yang valid untuk meningkatkan akurasi penelitian *in silico*. Pada penelitian sebelumnya, telah dilakukan pengumpulan data bahan alam laut dengan 770 senyawa tetapi data tersebut belum dihimpun menjadi suatu basis data. Data tersebut juga tidak memuat struktur tiga dimensi bahan alam laut tersebut. Oleh karena itu, penelitian ini bertujuan untuk membuat, mengoptimasi, dan melakukan validasi struktur tiga dimensi bahan alam laut dengan metode AM1-BCC serta membuat suatu basis data senyawa kimia dari bahan alam laut. Validasi dilakukan terhadap 769 struktur tiga dimensi senyawa dari bahan alam laut menggunakan perangkat lunak PyMOL. Berdasarkan hasil validasi, struktur tiga dimensi senyawa dengan format mol2 memberikan hasil struktur tiga dimensi dengan visualisasi terbaik dan paling sesuai. Pada penelitian ini, telah diperoleh basis data senyawa kimia dari bahan alam laut dengan komponen 770 SMILES, 770 struktur dua dimensi dalam format file png dan sdf, 769 struktur tiga dimensi dalam format mol2, pdb, dan pdbqt.

.....Approximately 70% of the Earth's surface is covered by oceans, which harbor valuable biological resources that have the potential to become medicines. Therefore, the development of drugs from marine sources has become a focus of research at present. However, the development of drugs from marine natural compounds faces challenges such as high costs, molecular complexity, limited resources, and environmental issues. To address these problems, *in silico* research has been used as a computational approach to identify potential drug compounds from marine natural sources. In *in silico* research, a database of chemical compounds with valid three-dimensional structures is required to improve the accuracy of the research. In previous studies, data collection of marine natural compounds with 770 compounds has been conducted, but this data has not been compiled into a database. Moreover, the data does not include the three-dimensional structures of the marine natural compounds. Therefore, this study aims to create, optimize, and validate the three-dimensional structures of marine natural compounds using the AM1-BCC method, as well as to establish a database of chemical compounds from marine natural sources. Validation was performed on 769 three-dimensional structures of compounds from marine natural sources using the PyMOL software. Based on the validation results, the three-dimensional structures in mol2 format provided the best and most suitable visualization. In this study, a database of chemical compounds from marine natural sources was obtained,

consisting of 770 SMILES components, 770 two-dimensional structures in png and sdf file formats, and 769 three-dimensional structures in mol2, pdb, and pdbqt formats.