

Penapisan virtual senyawa dari pangkalan data tanaman obat Indonesia sebagai inhibitor beta-sekretase 1 (bace1) menggunakan autodock dan autodock vina = Virtual screening of Indonesian herbal database as beta secretase 1 inhibitor (bace1) using autodock and autodock vina

Asti Anna Tanisa, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20432142&lokasi=lokal>

Abstrak

Alzheimer merupakan penyakit neurodegeneratif yang dapat disebabkan oleh penumpukan plak tanda penuaan pada otak dan mempengaruhi kerja neuron sehingga neuron menjadi kurang sensitif terhadap respon selular. Penelitian terdahulu menemukan bahwa enzim BACE1 berperan penting dalam proses pembentukan plak tanda penuaan sehingga dapat menjadi target pengobatan penyakit Alzheimer. Pada penelitian ini, dilakukan penapisan virtual senyawa dari basis data tanaman obat Indonesia sebagai inhibitor BACE1 menggunakan Autodock dan Autodock Vina yang divalidasi menggunakan basis data A Directory of Useful Decoys: Enhanced (DUD-E). Validasi dilakukan terhadap kedua peranti lunak menggunakan parameter Enrichment Factor, Receiver Operating Characteristics, dan Area Under Curve.

Kesimpulan dari validasi adalah ukuran grid box yang digunakan pada Autodock yaitu grid 30x30x30 dan 11,25x11,25x11,25 pada Vina (setelah penyetaraan unit). Nilai EF 1% dan AUC grid 30 pada Autodock adalah 7,74 dan 0,73, sedangkan pada Vina adalah 4,6 dan 0,77. Berdasarkan hasil penapisan virtual, diperoleh 6 peringkat teratas senyawa menggunakan Autodock (energi ikat kkal/mol -7,84 ~ -8,79) yaitu Azadiradione, Cylindrin, Lanosterol, Sapogenin, Simiarenol, dan Taraxerol. Hasil penapisan virtual pada Autodock Vina memberikan 7 senyawa peringkat teratas (energi ikat kkal/mol -8,8 ~ -9,4) yaitu Bryophyllin A, Diosgenin, Azadiradione, Sojagol, Beta amyryn, Epifriedelinol, dan Jasmolactone C. Hanya Azadiradione yang memberikan hasil penapisan virtual pada kedua peranti lunak dan berinteraksi dengan daerah aktif BACE1 pada residu Trp 76 dari Autodock dan Thr 232 dari Autodock Vina.

.....Lzheimer's is a neurodegenerative disease that can be caused by buildup of plaque signs of aging in the brain and affect the work of neurons so neurons become less sensitive to cellular responses. Research previously found that the BACE1 enzyme plays an important role in the process Plaque formation is a sign of aging so that it can become a treatment target Alzheimer's disease. In this study, virtual screening of compounds from database of Indonesian medicinal plants as using BACE1 inhibitors Autodock and Autodock Vina are validated using A database Directory of Useful Decoys: Enhanced (DUD-E). Validation is carried out against both software uses Enrichment Factor, Receiver Operating Characteristics, and Area Under Curve.

Conclusion of validation is the size of the grid box used in Autodock, which is a 30x30x30 and grid 11,25x11,25x,25,25 for Vina (after equalization unit). EF value of 1% and AUC grid 30 in Autodock is 7.74 and 0.73, while in Vina it is 4.6 and 0.77. Based on the results of virtual screening, obtained the top 6 compounds using Autodock (kcal / mol binding energy -7.84 ~ -8.79) namely Azadiradione, Cylindrin, Lanosterol, Sapogenin, Simiarenol, and Taraxerol. Screening results virtual on Autodock Vina provides 7 top-ranked compounds (binding energy kcal / mol -8.8 ~ -9.4) namely Bryophyllin A, Diosgenin, Azadiradione, Sojagol, Beta amyryn, Epifriedelinol, and Jasmolactone C. Only Azadiradione provide virtual screening results on both software and interact with BACE1 active area on Trp 76 residue from Autodock

and Thr 232 from Autodock Vina.