

Optimasi parameter autodock untuk validasi penapisan virtual pada plasmodium falciparum enoyl carrier reductase pfenr menggunakan basis data a directory of useful decoy = Autodock and parameter optimazion for virtual screening validation of plasmodium falciparum enoyl carrier reductase pfenr using a directory of useful decoys database

Elmahery Sri Pratiwy, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20347716&lokasi=lokal>

Abstrak

Malaria merupakan salah satu penyakit yang menyebabkan korban jutaan jiwa setiap tahun. Plasmodium falciparum Enoyl Acyl Carrier Protein Reductase (PfENR) adalah enzim yang berperan dalam perkembangan parasit malaria. Pada saat ini telah ditemukan berbagai pengobatan untuk penyakit malaria di dunia, terutama di Indonesia, pengobatan yang telah banyak manfaatnya bagi masyarakat, seperti pada penggunaan obat konvensional maupun tradisional. Seiring perkembangan teknologi, khususnya pada bidang ilmu farmasi, metode virtual screening atau penapisan virtual mulai dikembangkan. Jenis penapisan in silico yang akan dilakukan dalam penelitian ini adalah penapisan berbasis struktur dengan menggunakan Basis Data dari A Directory of Useful Decoy (DUD) dan menggunakan program Autodock mendapatkan parameter optimum pada Grid Box 80 x 80 x 80 serta nilai EF 1% sebesar 55,5, EF 10% sebesar 7,2 dan EF 20% sebesar 3,29 dengan AUC ROC sebesar 0,927.

Malaria is one of diseases that annually emerge millions victim. Plasmodium Falciparum Enoyl Acyl Carrier Reductase (PfENR) is an enzyme target that important for growth of the malaria parasite. Recently, there were a malaria treatment, especially in Indonesia, which has many medical benefits for society, such as the use of conventional and traditional medicine. In a row with the development of technology, especially in classfier for pharmaceutical sciences, virtual screening methods or virtual screening was developed. The chosen in silico screening in this experiment is structure-based screening by using a database from the A Directory of Useful decoys (DUD) and using the program AutoDock, obtain optimum parameters on Grid Box 80 x 80 x 80 and the EF 1% at 55, 5, 10% at 7.2 EF and EF of 3.29 with a 20% AUC ROC of 0.927.