

NASKAH TUTORIAL

MOLECULAR DOCKING MENGUNAKAN AUTODOCK

**OLEH: APT. YENI, S.FARM., M.SI.
NIDN: 0308049102**

FAKULTAS FARMASI DAN SAINS
PROGRAM STUDI FARMASI
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PROF. DR. HAMKA
JAKARTA
JUNI 2022

APLIKASI YANG HARUS DIINSTALL

Mgltools	https://ccsb.scripps.edu/mgltools/downloads/
AutoDock	https://autodock.scripps.edu/download-autodock4/
BIOVIA Discovery Studio Visualizer	https://discover.3ds.com/discovery-studio-visualizer-download
Notepad ++	https://notepad-plus-plus.org/downloads/
Marvin Sketch	https://docs.chemaxon.com/display/lts-europium/marvinsketch-downloads.md
Avogadro	https://sourceforge.net/projects/avogadro/files/latest/download

Note: Aplikasi diinstall di DATA (D:)

DATA YANG HARUS DISIAPKAN

- File PDB target/reserptor yang didownload pada <https://www.rcsb.org/>. Pastikan file yang didownload memiliki resolusi $\leq 3.0 \text{ \AA}$, tidak mengalami mutasi, berasal dari organisme homo sapiens atau organisme target pengobatan dan memiliki ligan alami/native ligand.
- Ligan uji yang telah didownload dari <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/> dalam format 3D .sdf atau ligan uji dapat digambar dengan aplikasi Marvin Sketch (2D format .mol) dan dioptimasi dengan aplikasi Avogadro (3D format .pdb)

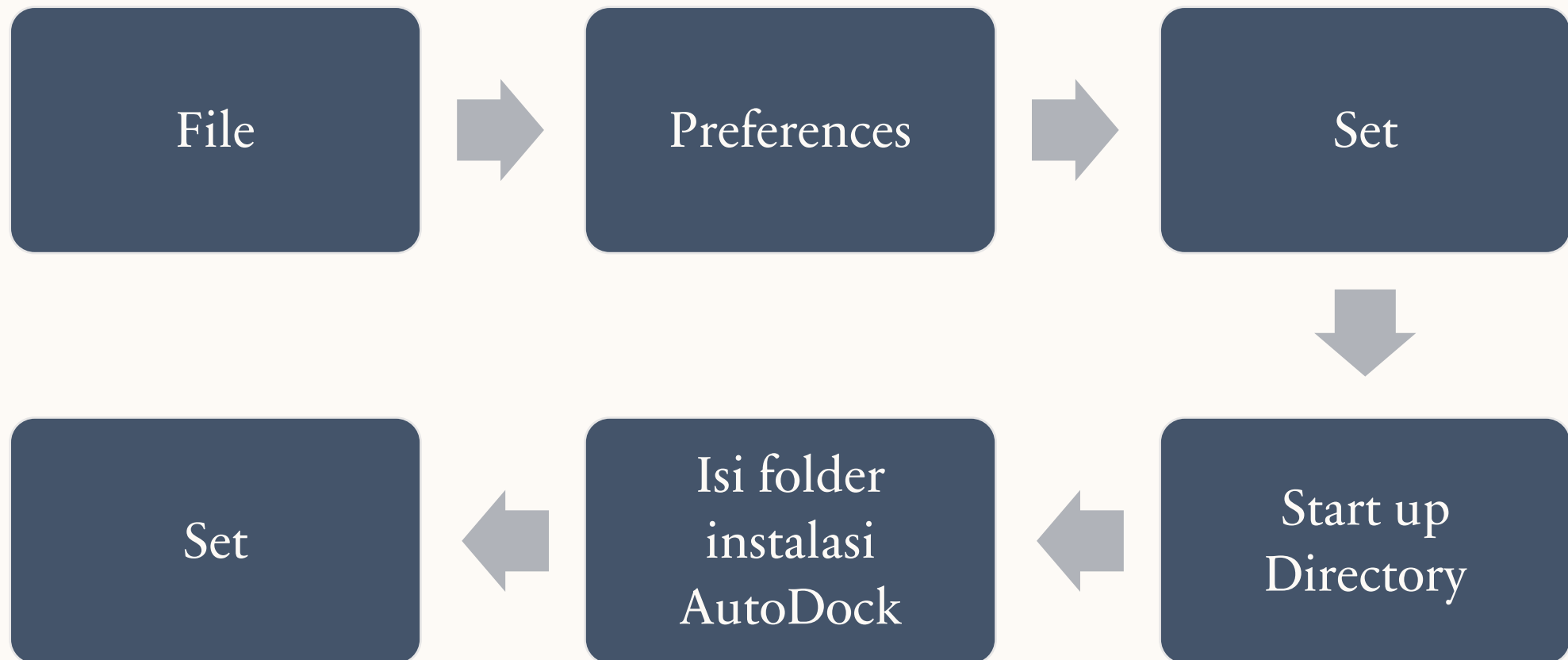
PREPARASI TARGET DAN LIGAN

1. Buka aplikasi BIOVIA Discovery Studio Visualizer
2. Preparasi target dengan memisahkan reseptor sendiri
3. Preparasi native ligand dengan memisahkan ligan sendiri, kemudian dilakukan penambahan hydrogen dengan mengklik Chemistry → Hydrogens → Add → Save format .pdb

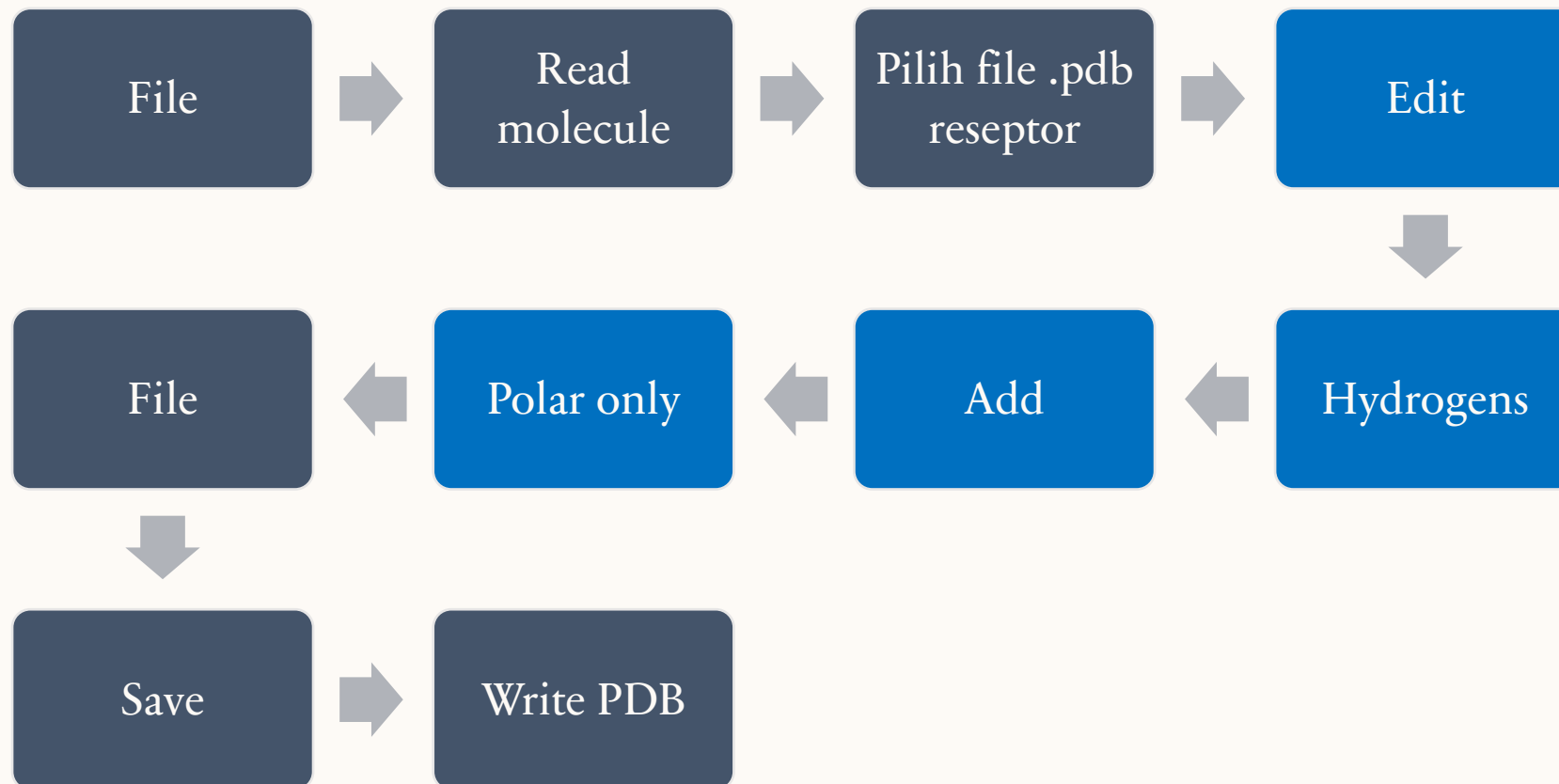
TAHAPAN DOCKING (AUTODOCK & MGLTOOLS)

1. Atur path kerja yang digunakan
2. Masukkan file target/reseptor
3. Masukkan file ligan
4. Pemilihan torsi
5. Pengaturan parameter docking (Grid)
6. Docking

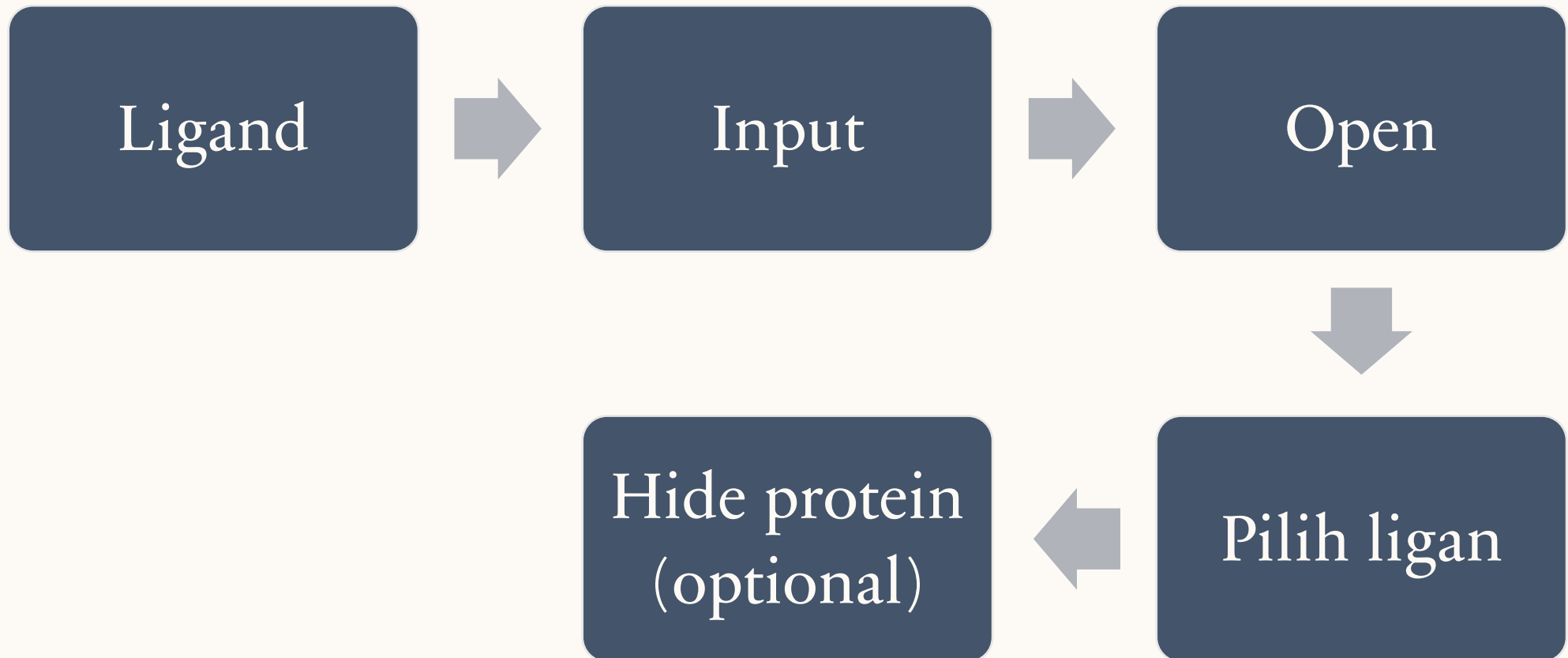
ATUR PATH KERJA YANG DIGUNAKAN



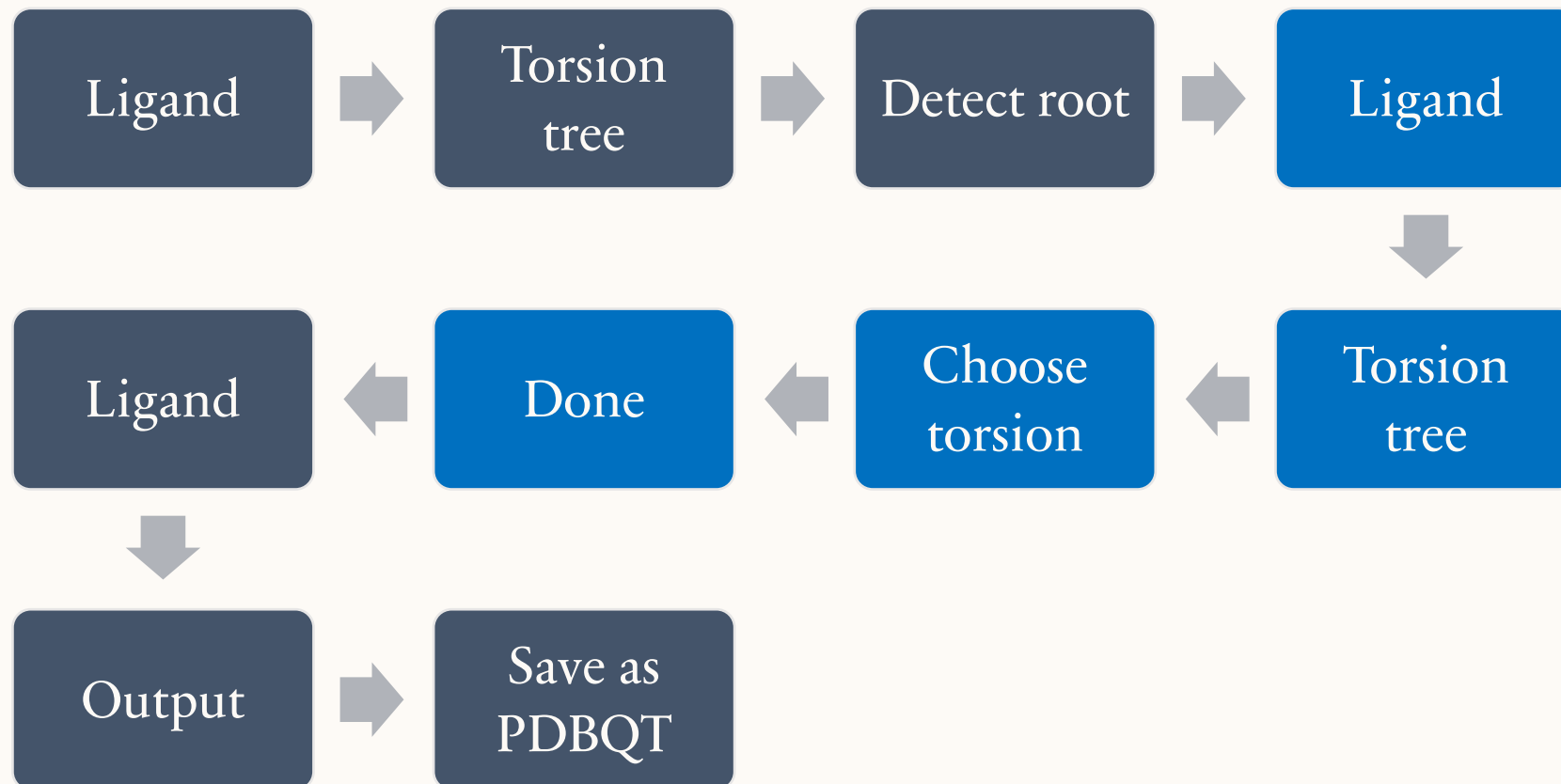
MASUKKAN FILE TARGET/RESEPTOR



MASUKKAN FILE LIGAN

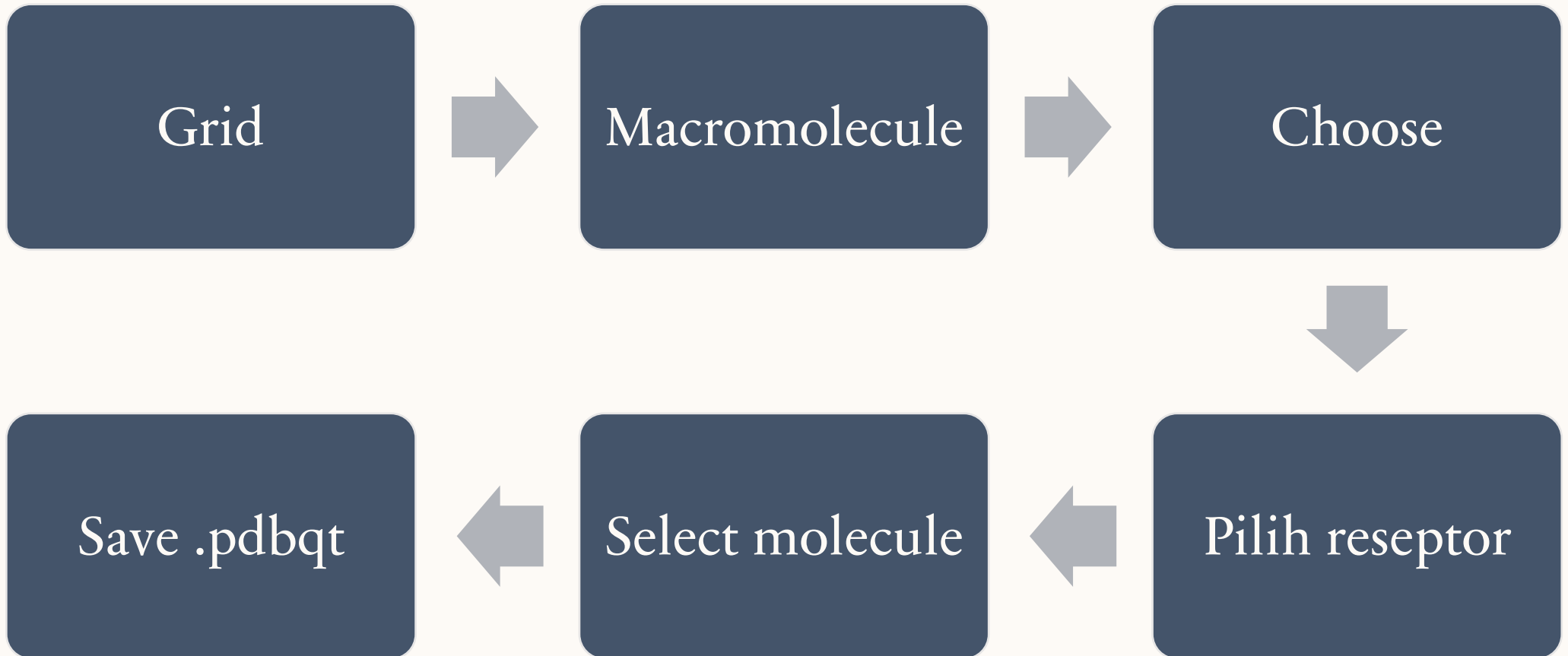


PEMILIHAN TORSI

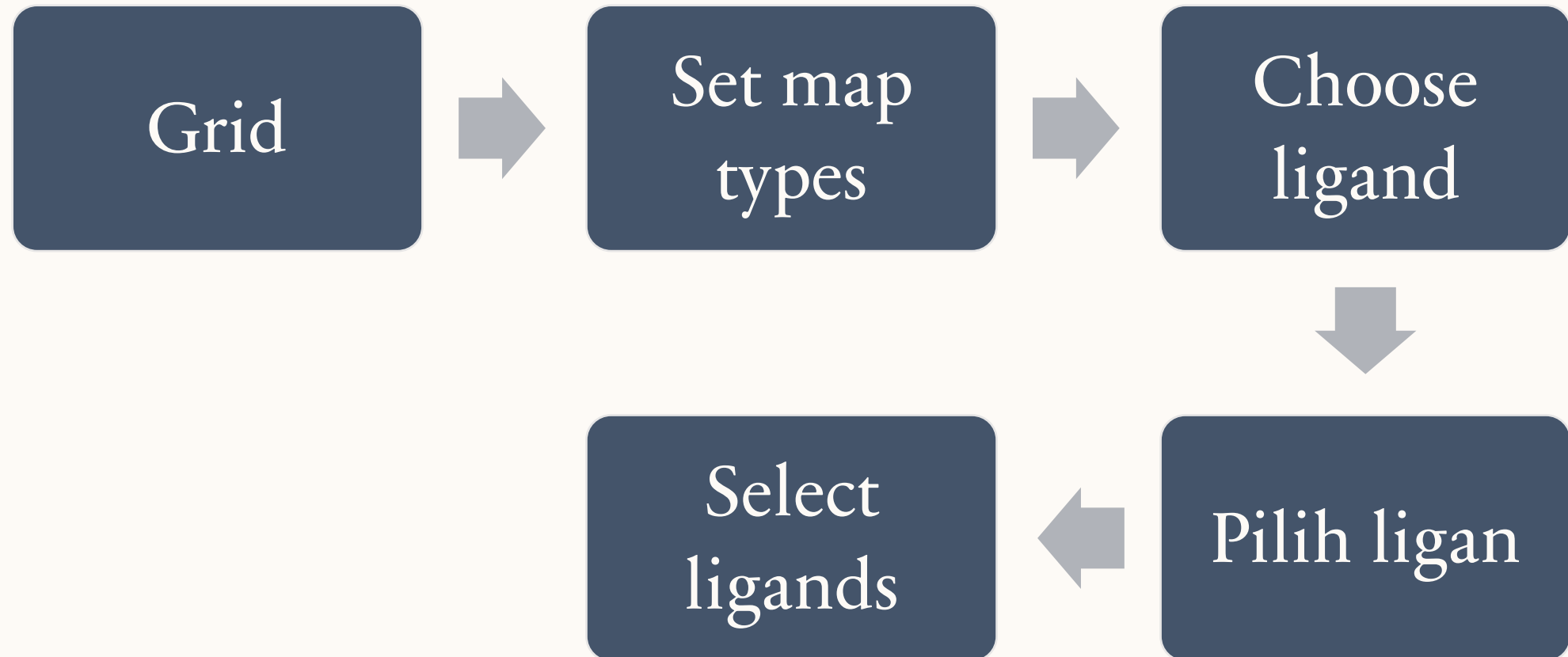


PENGATURAN PARAMETER DOCKING (GRID)

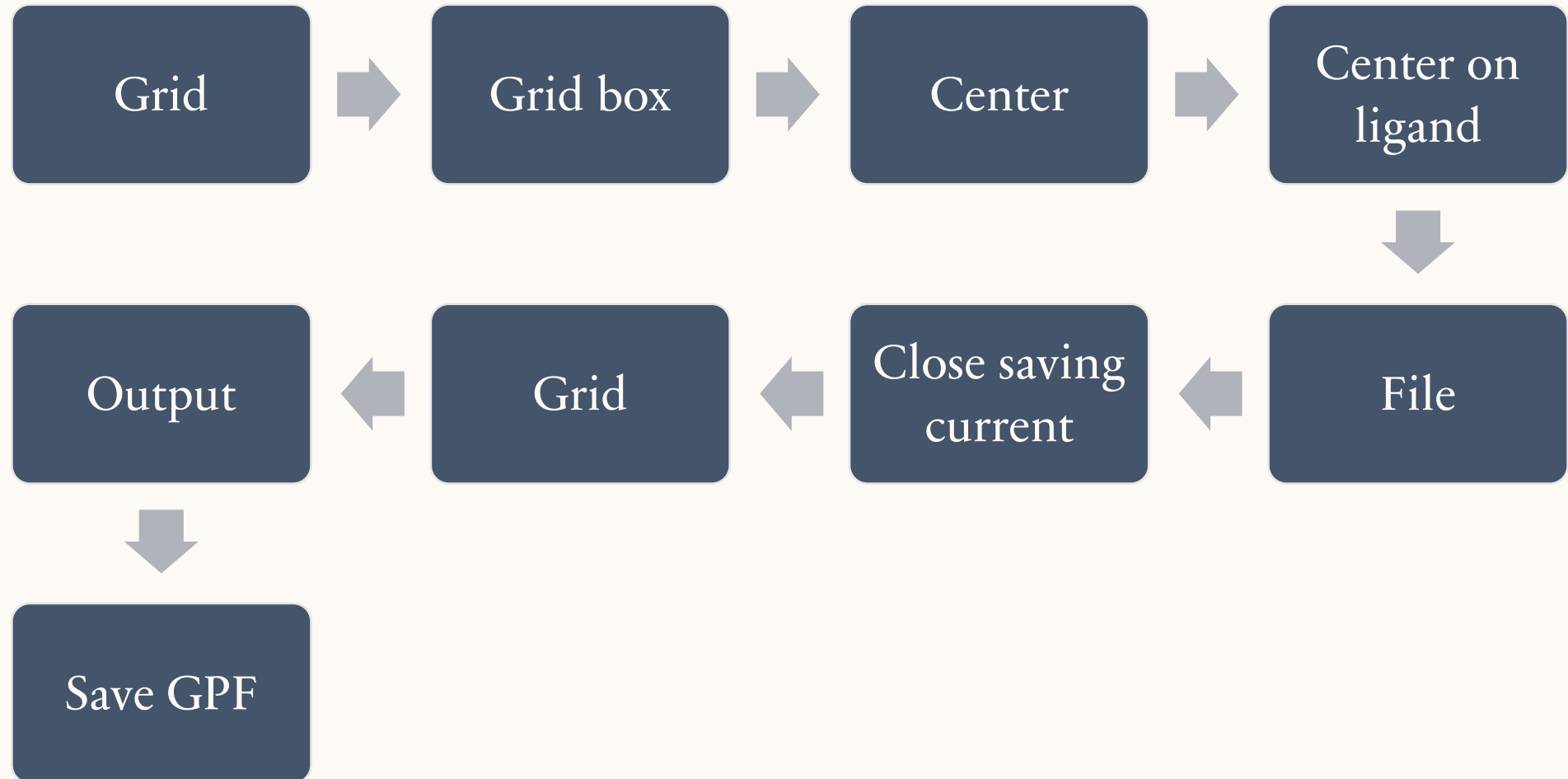
10



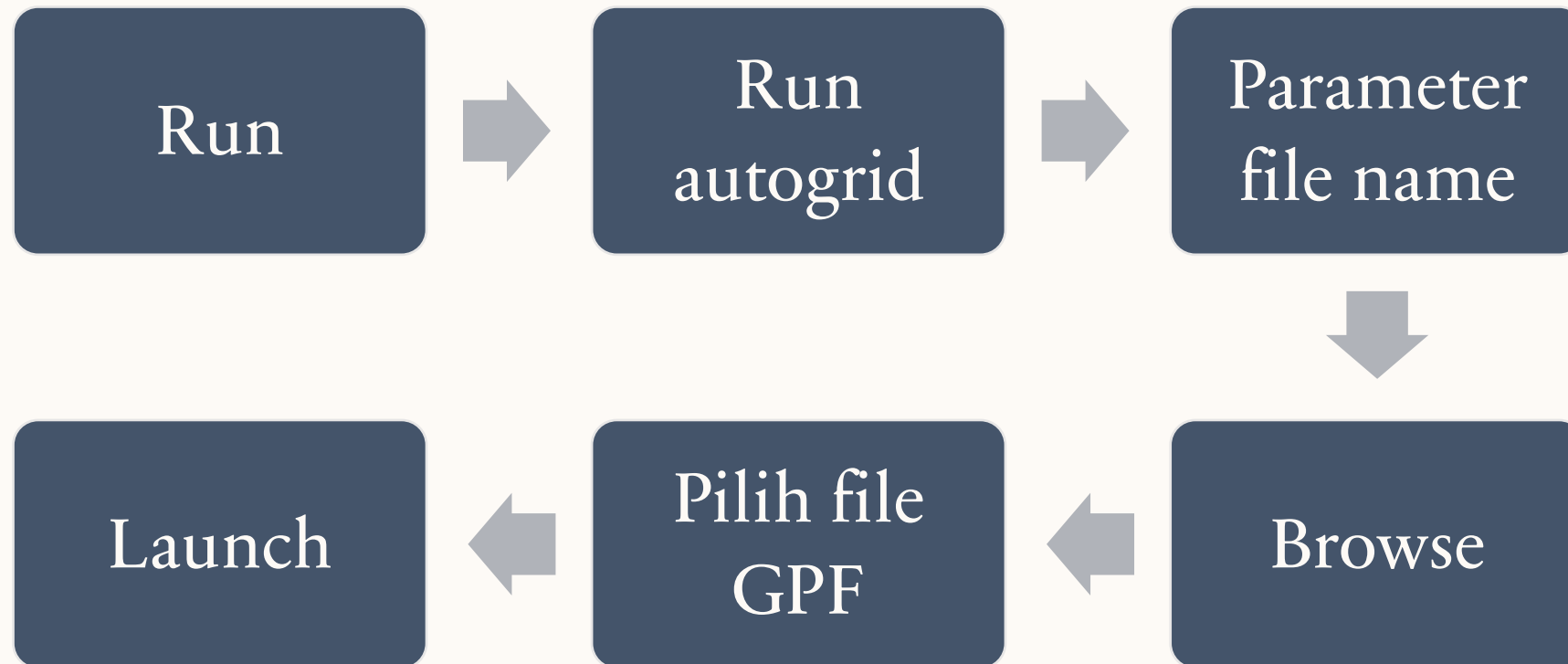
PENGATURAN PARAMETER DOCKING (GRID)



PENGATURAN PARAMETER DOCKING (GRID)



PENGATURAN PARAMETER DOCKING (GRID)



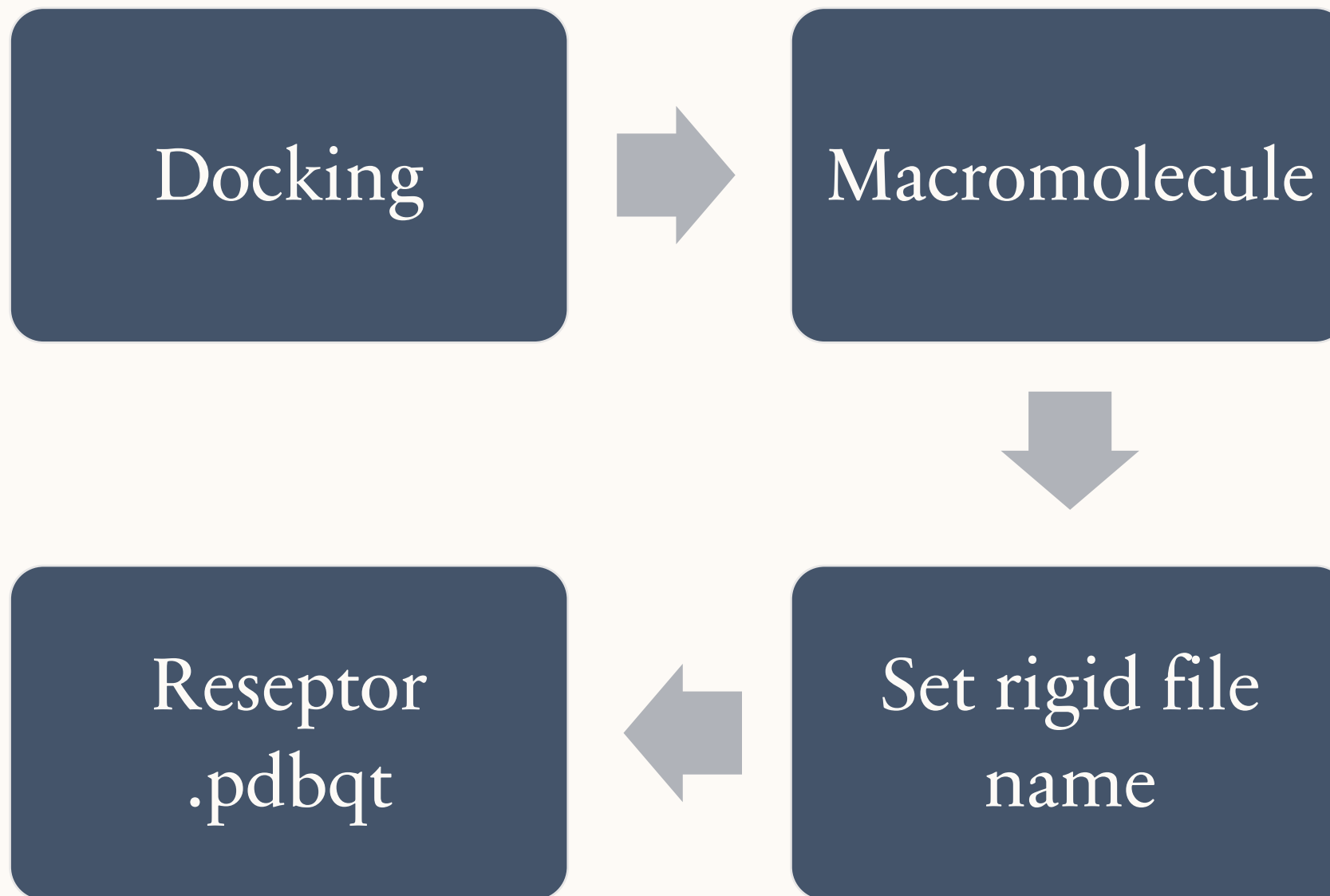
Didapatkan:

Koordinat Central Grid Point (x, y, dan z)

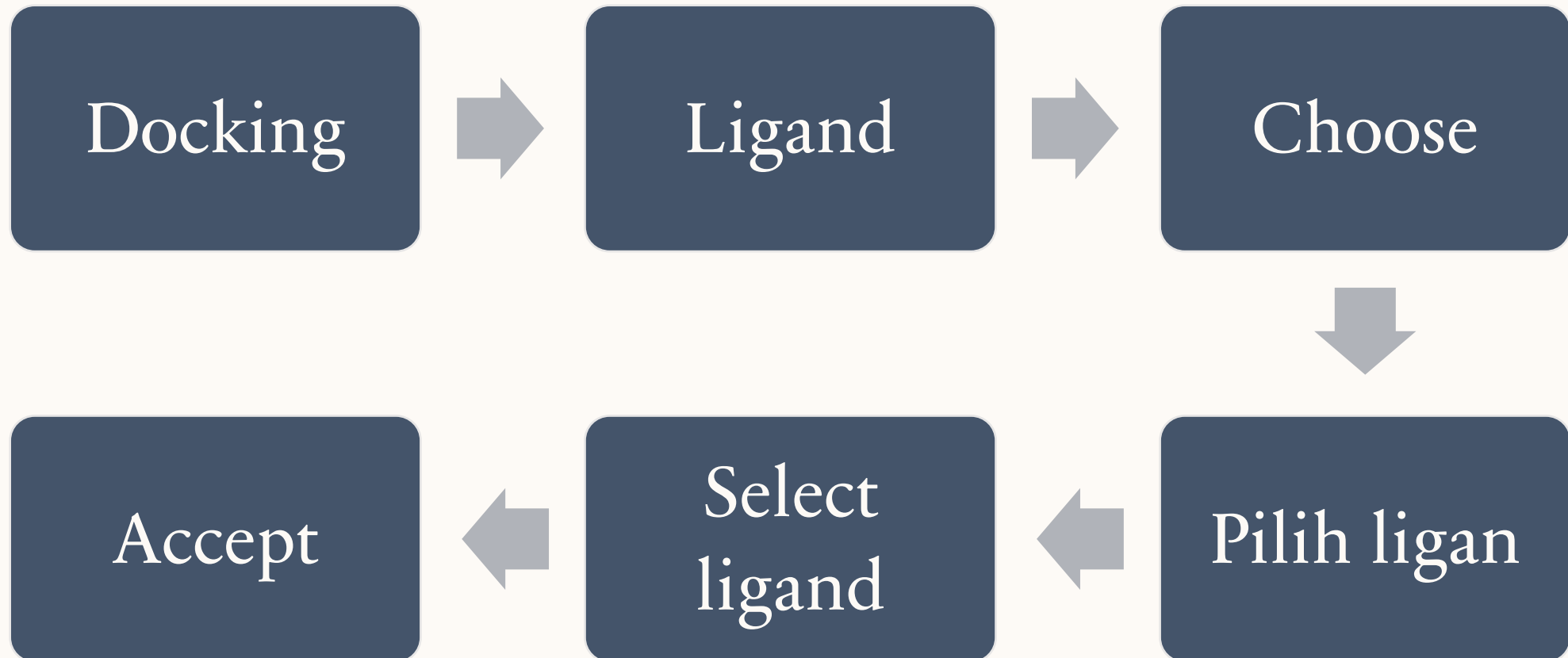
Grid Size (x, y, dan z)

DOCKING

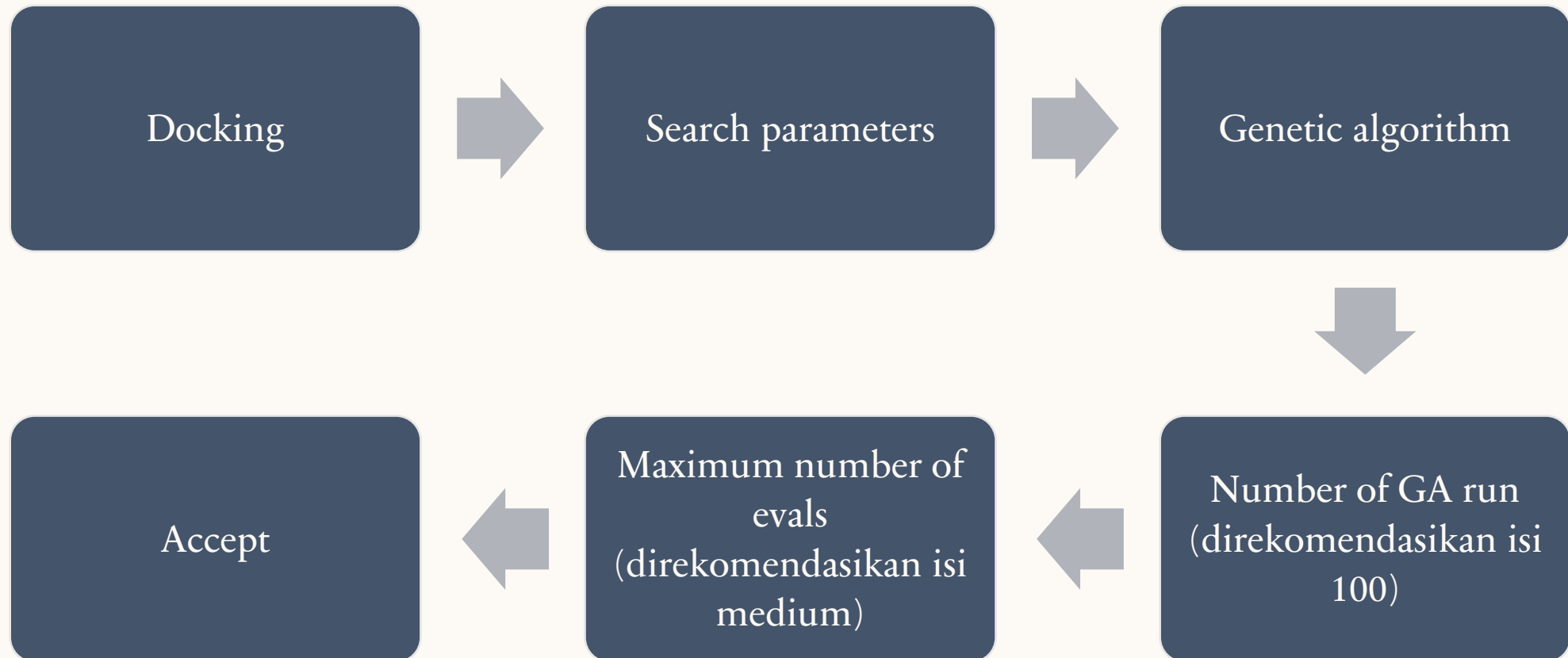
14



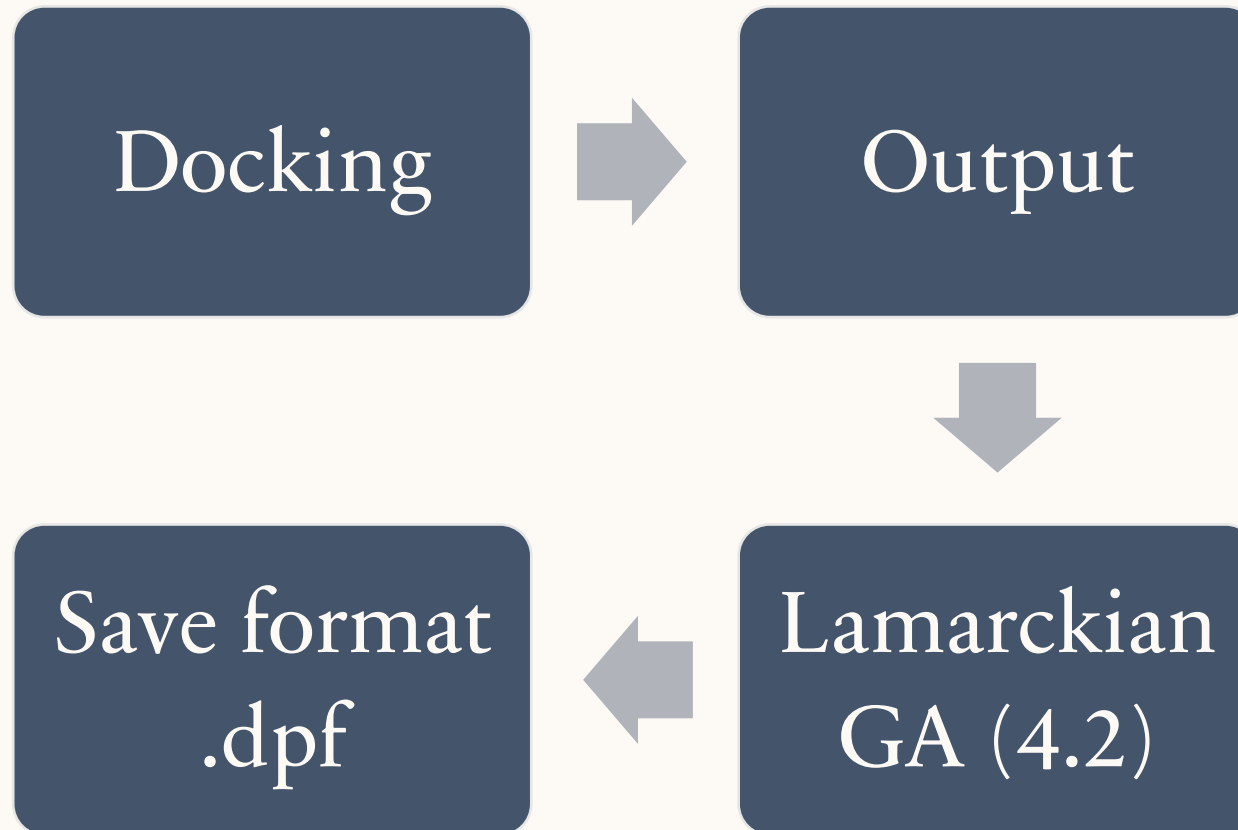
DOCKING



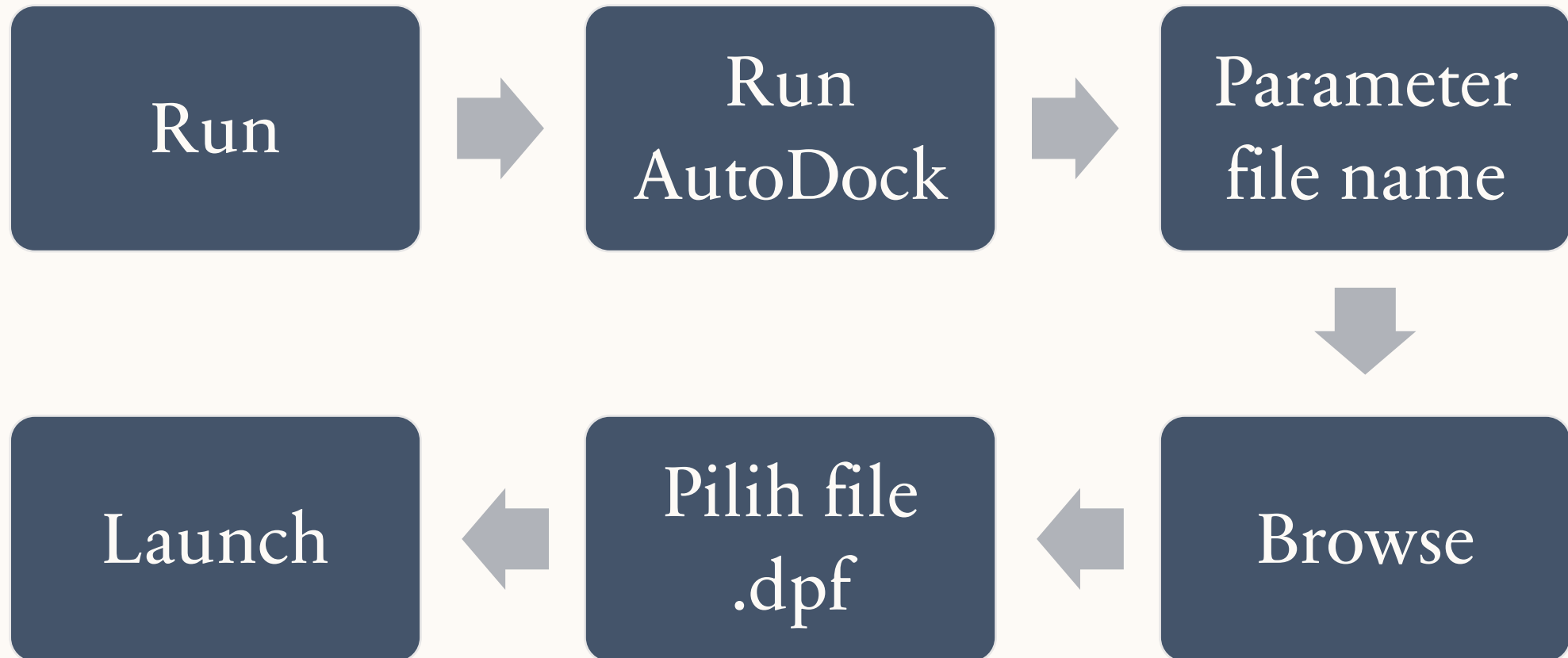
DOCKING



DOCKING



DOCKING



NOTE

19

- Lihat RMSD native ligand sebelum dan sesudah docking (redocking) pada file .dlg hasil docking atau menggunakan BIOVIA Discovery Studio Visualizer
- RMSD native ligand sebelum dan sesudah docking $\leq 2.0 \text{ \AA}$ (valid) menunjukkan bahwa parameter docking dapat digunakan untuk docking senyawa uji

Parameter docking:

- Koordinat Central Grid Point (x, y, dan z)
- Grid Size (x, y, dan z)
- Number of GA Run
- Maximum Number of Evals

**THANK
YOU**