

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

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)

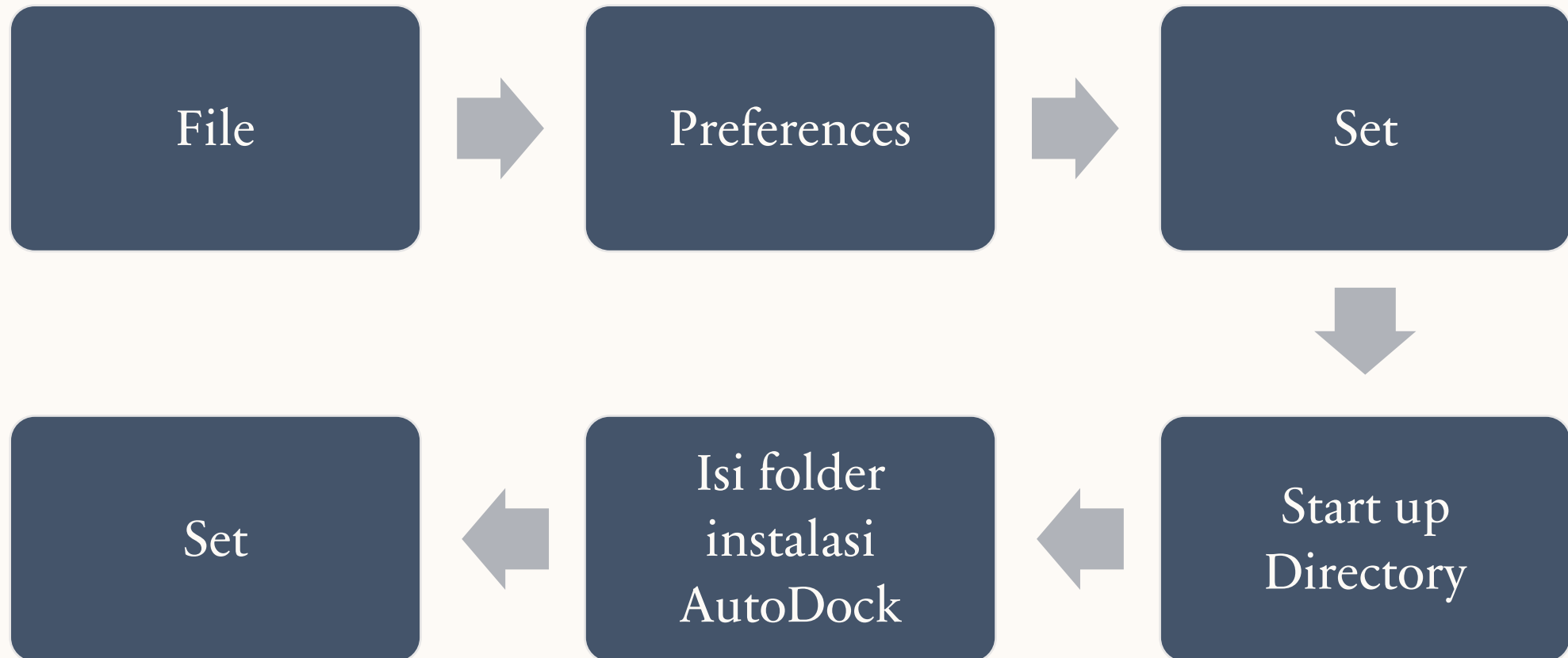
# PREPARASI TARGET DAN LIGAN

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

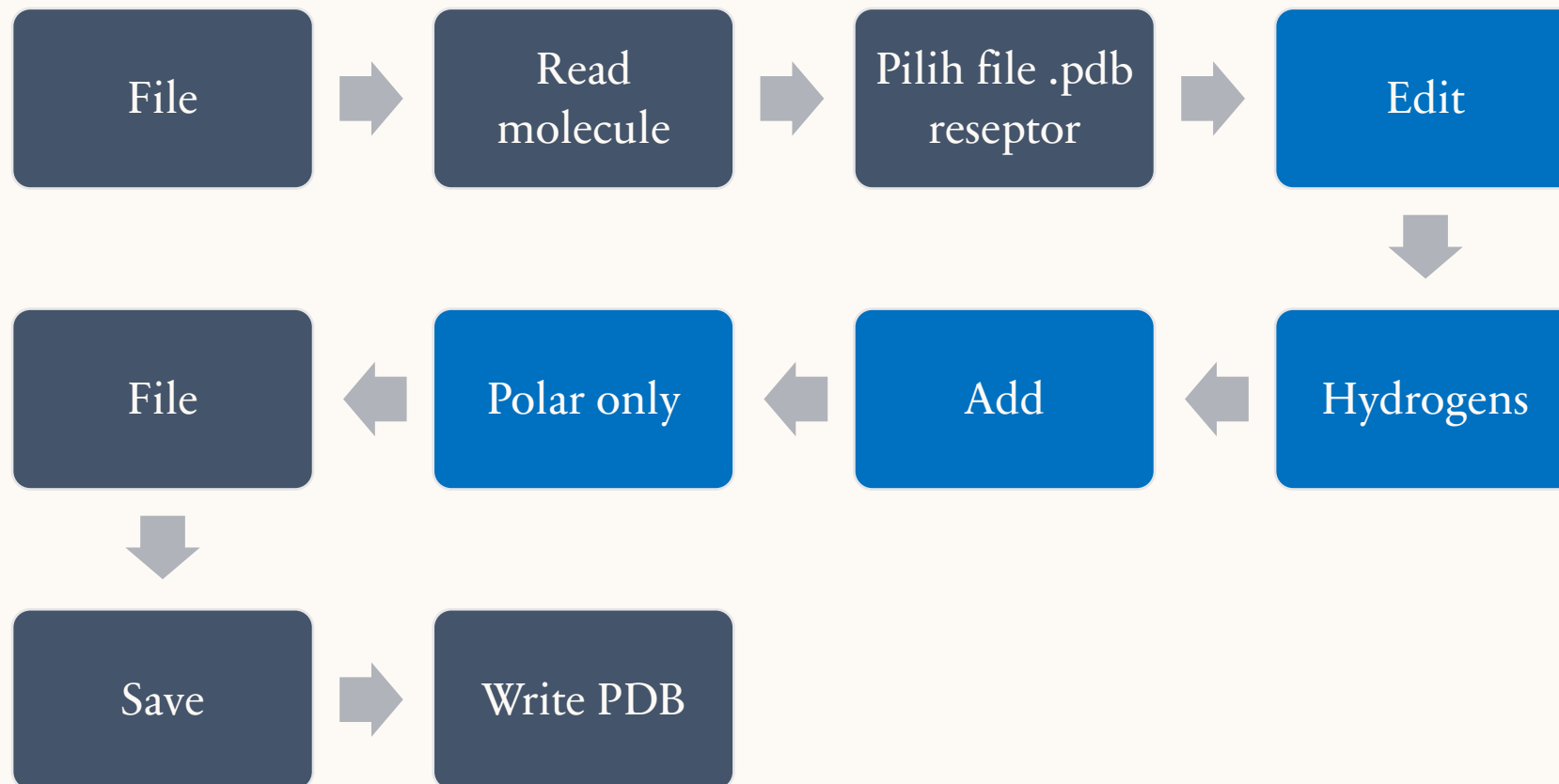
# **TAHAPAN DOCKING (AUTODOCK & MGLTOOLS)**

1. Atur path kerja yang digunakan
2. Masukkan file target/reseptor
3. Masukkan file ligan
4. Hapus nonpolar hydrogen (jika ada)
5. Tambahkan hydrogen polar
6. Hitung Muatan Gasteiger
7. Gabungkan nonpolar hydrogen
8. Pemilihan torsi
9. Pengaturan parameter docking (Grid)
10. Docking

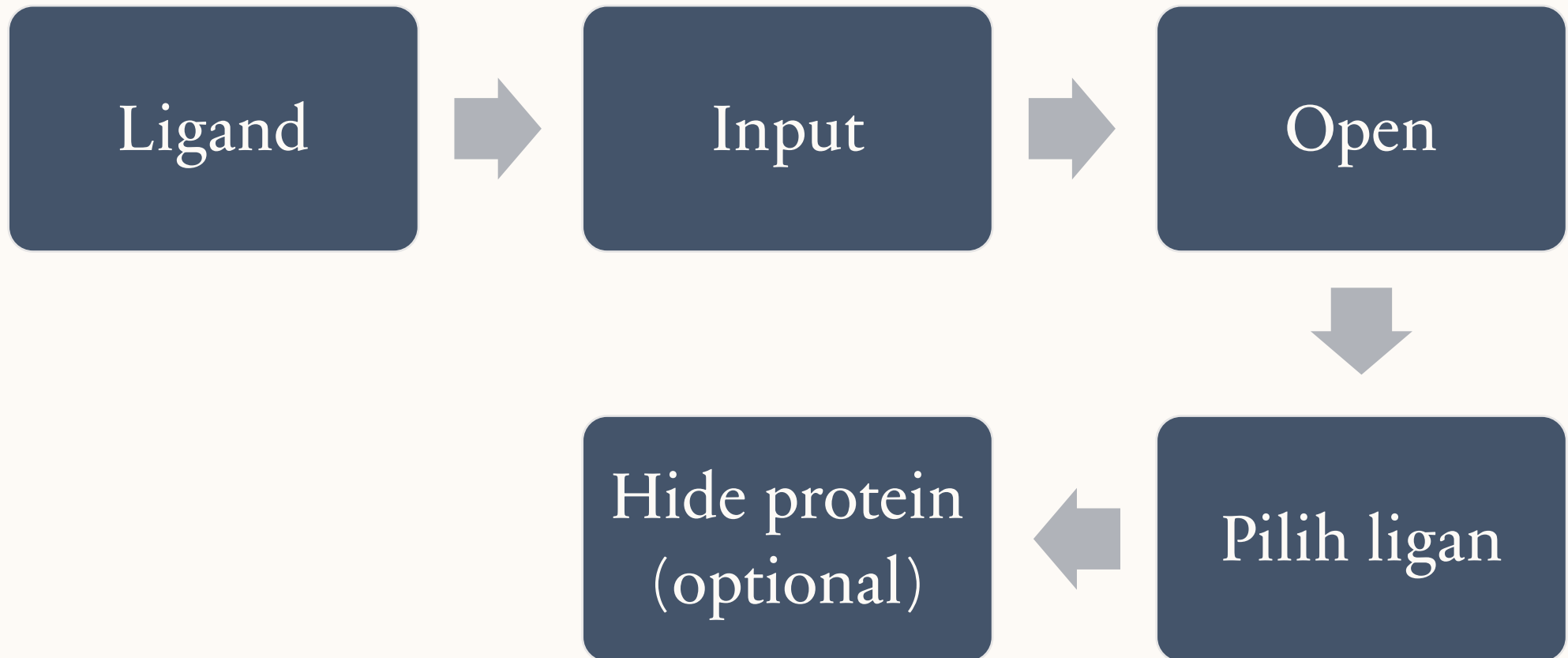
# ATUR PATH KERJA YANG DIGUNAKAN



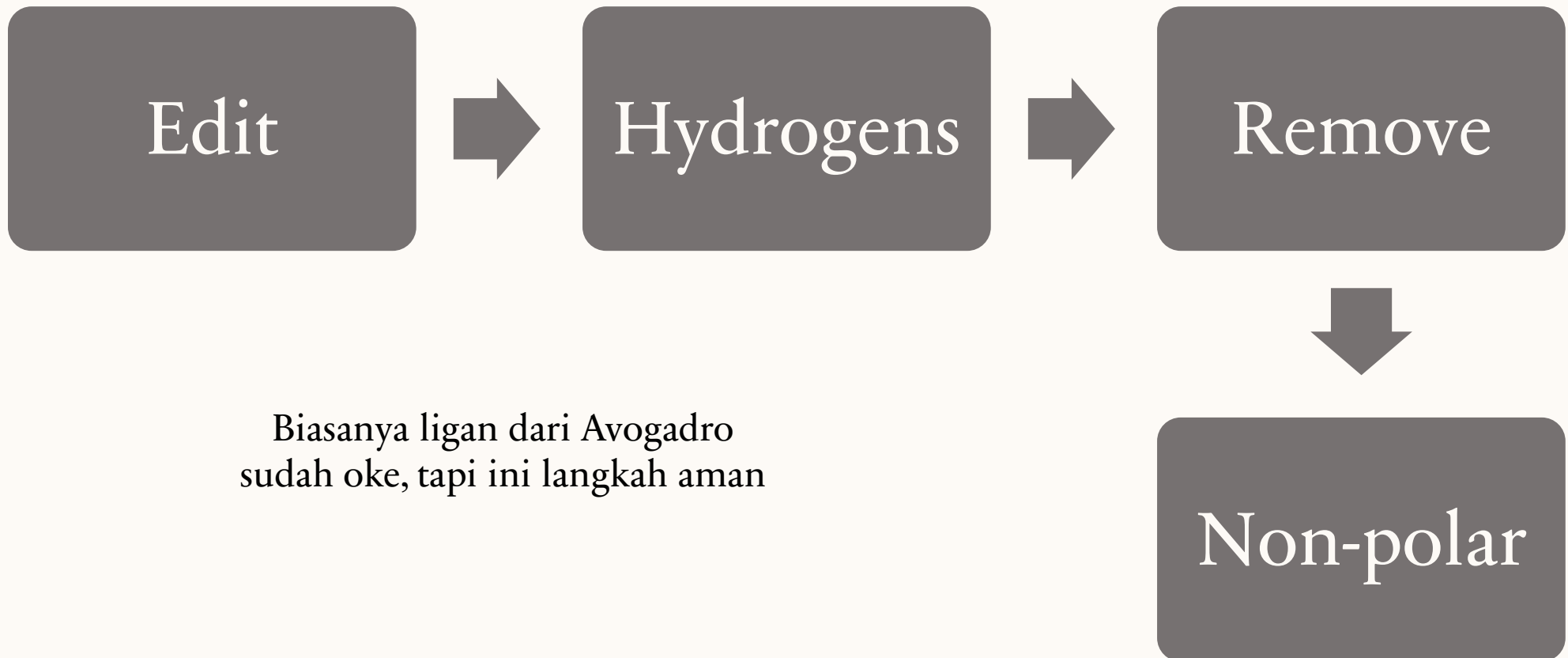
# MASUKKAN FILE TARGET/RESEPTOR



## MASUKKAN FILE LIGAN

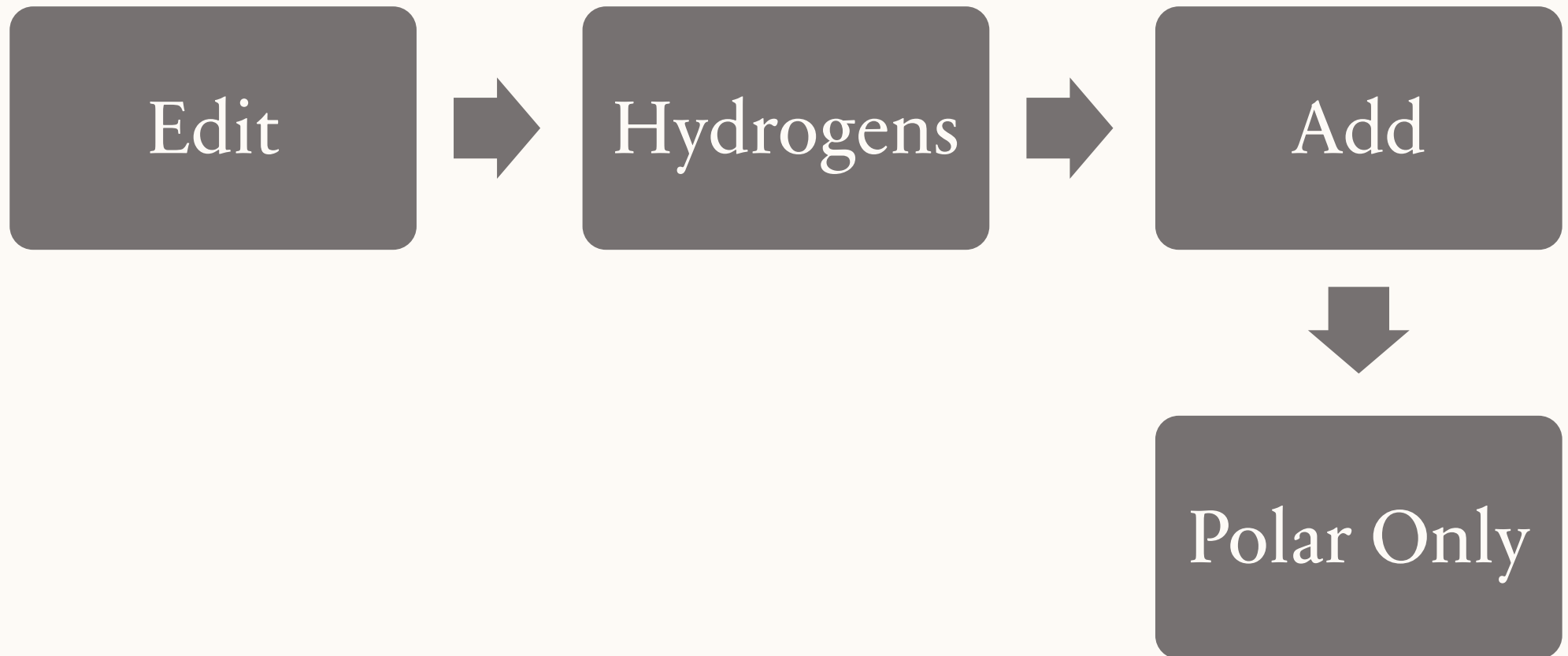


# HAPUS NONPOLAR HYDROGEN (JIKA ADA)

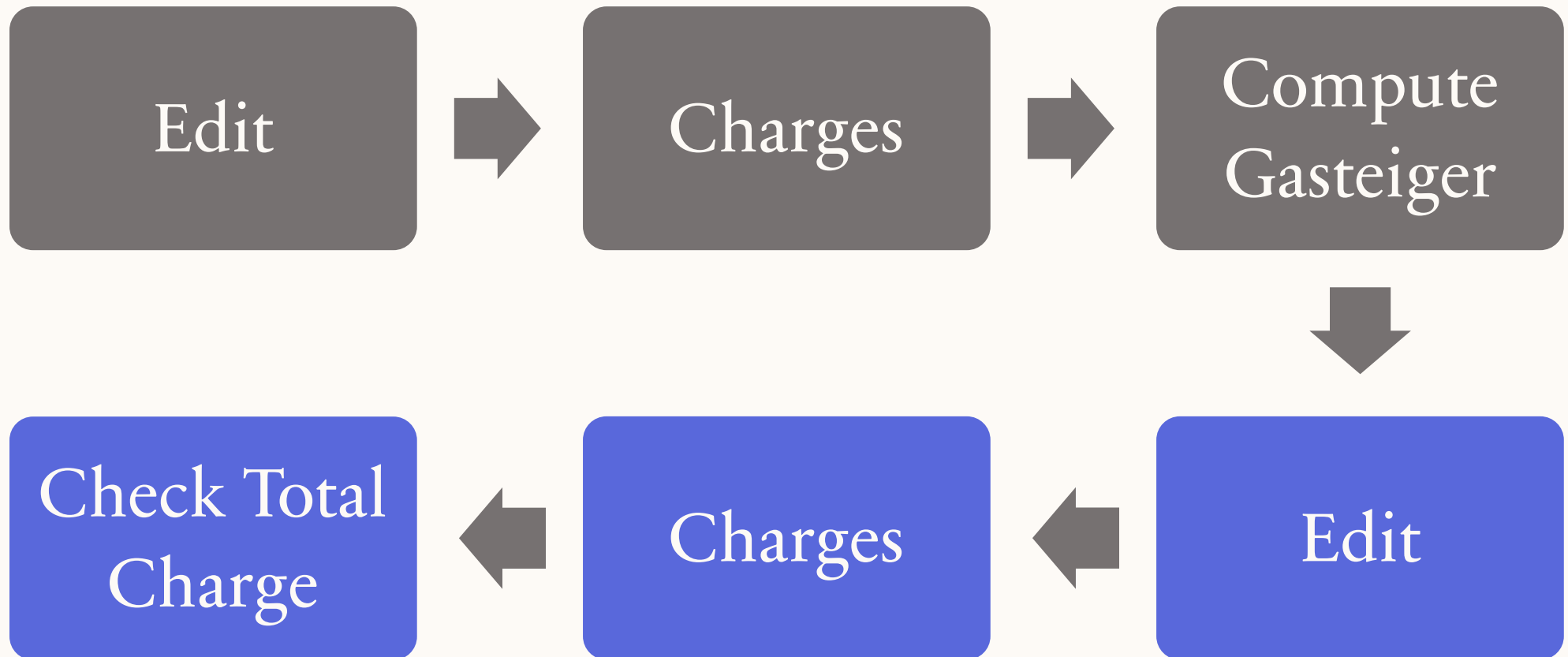


Biasanya ligan dari Avogadro sudah oke, tapi ini langkah aman

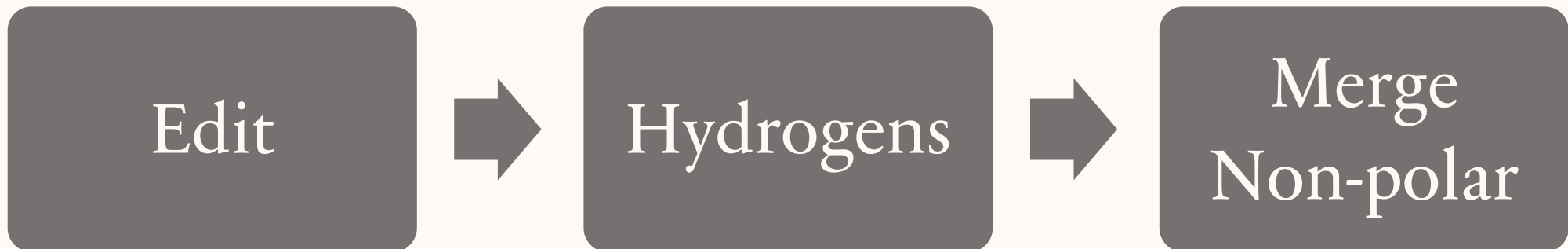
# TAMBAHKAN HYDROGEN POLAR



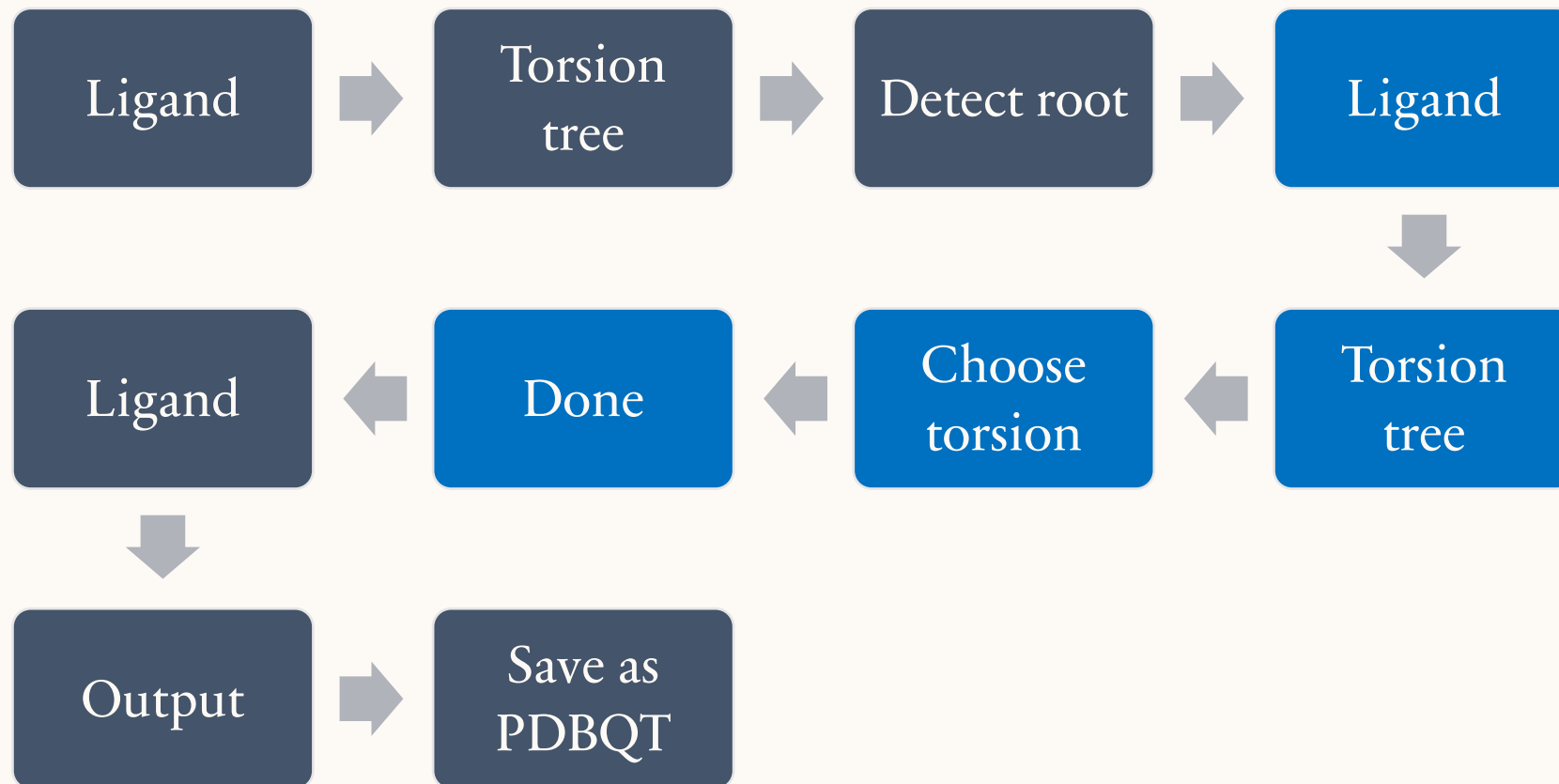
# HITUNG MUATAN GASTEIGER



# GABUNGGAN NONPOLAR HYDROGEN

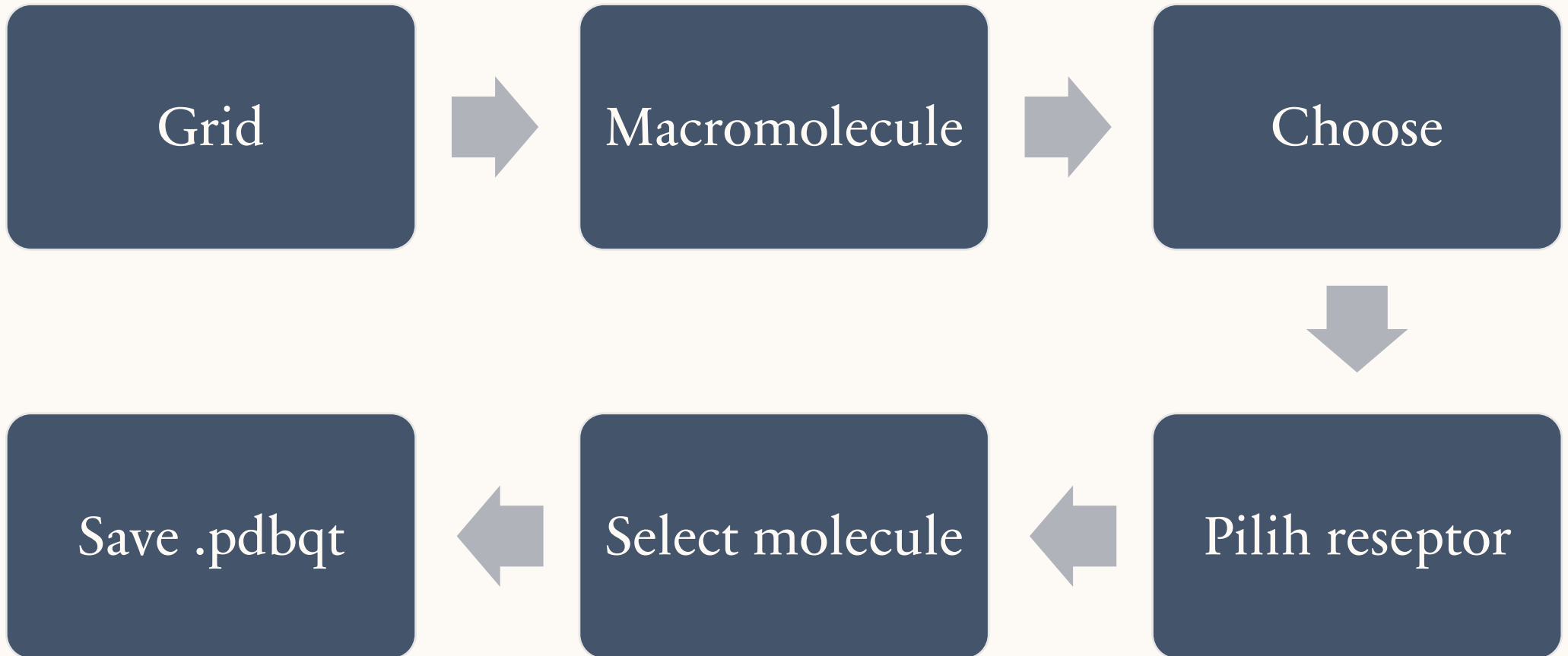


# PEMILIHAN TORSI

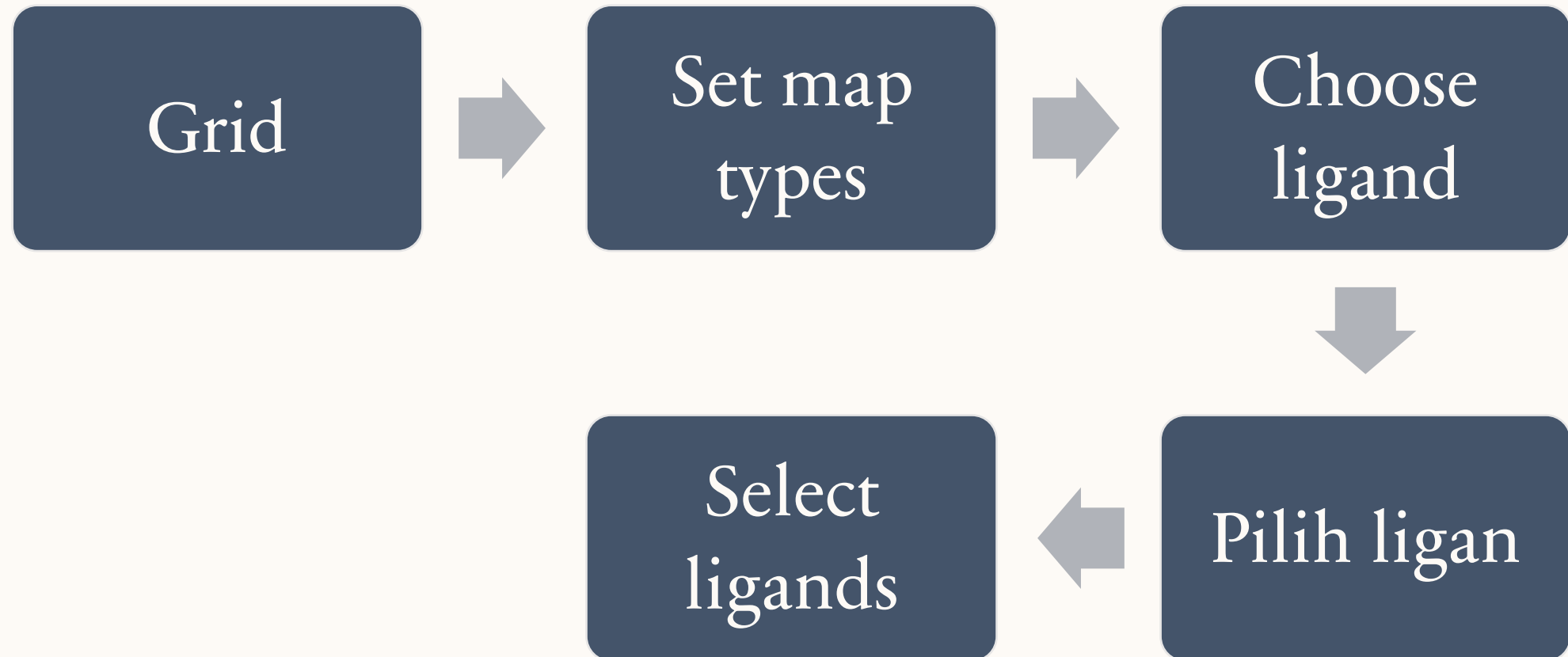


# PENGATURAN PARAMETER DOCKING (GRID)

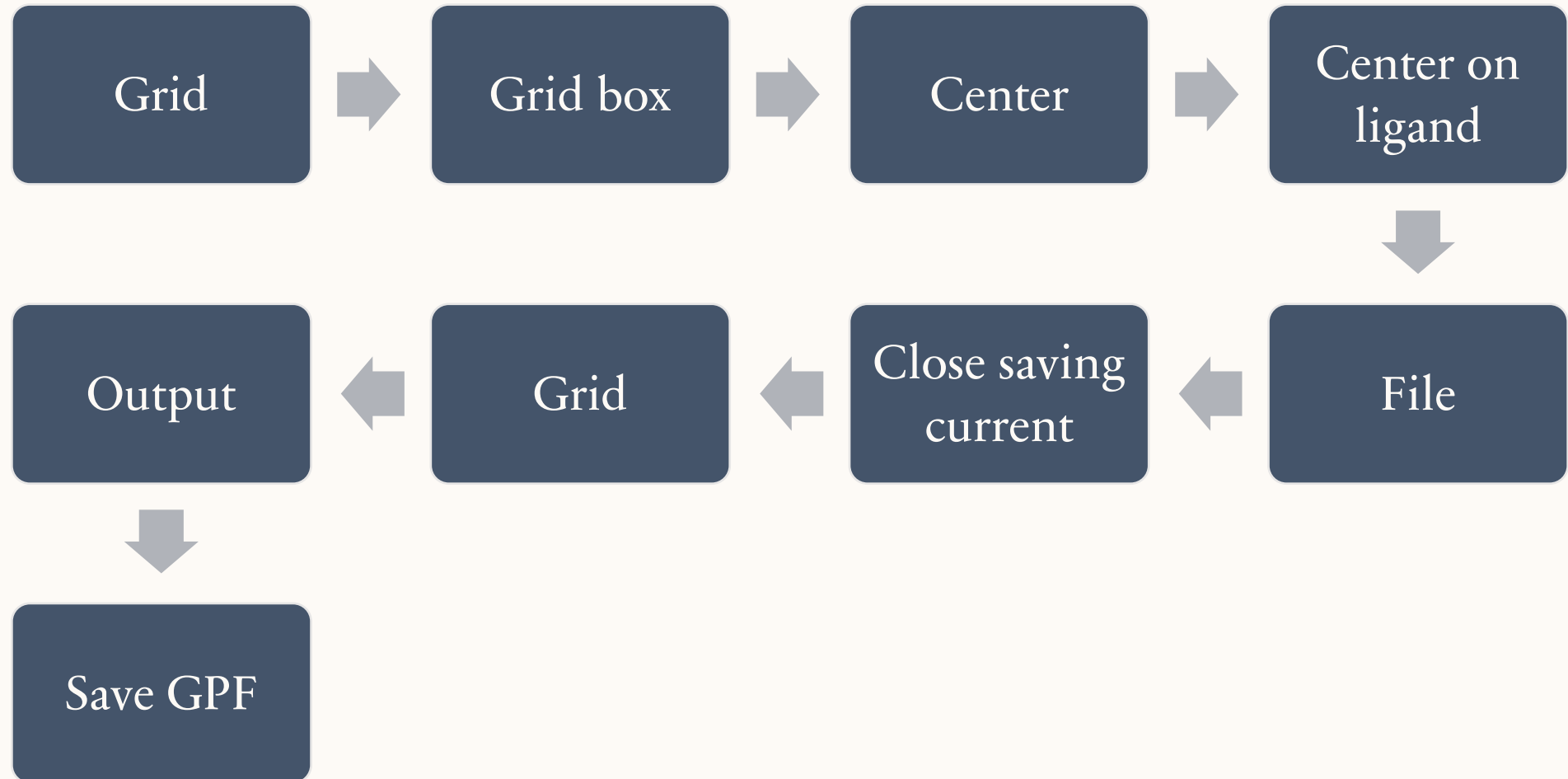
14



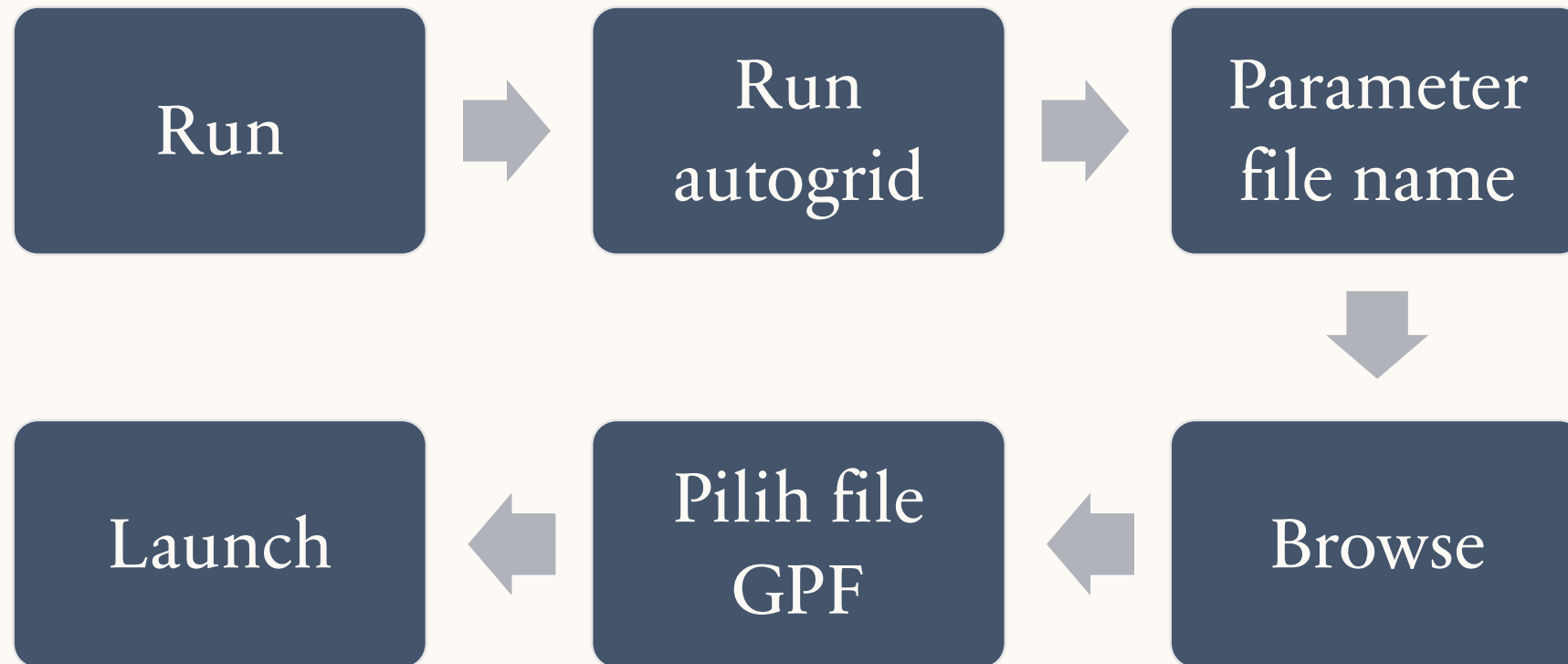
## PENGATURAN PARAMETER DOCKING (GRID)



# PENGATURAN PARAMETER DOCKING (GRID)



## PENGATURAN PARAMETER DOCKING (GRID)



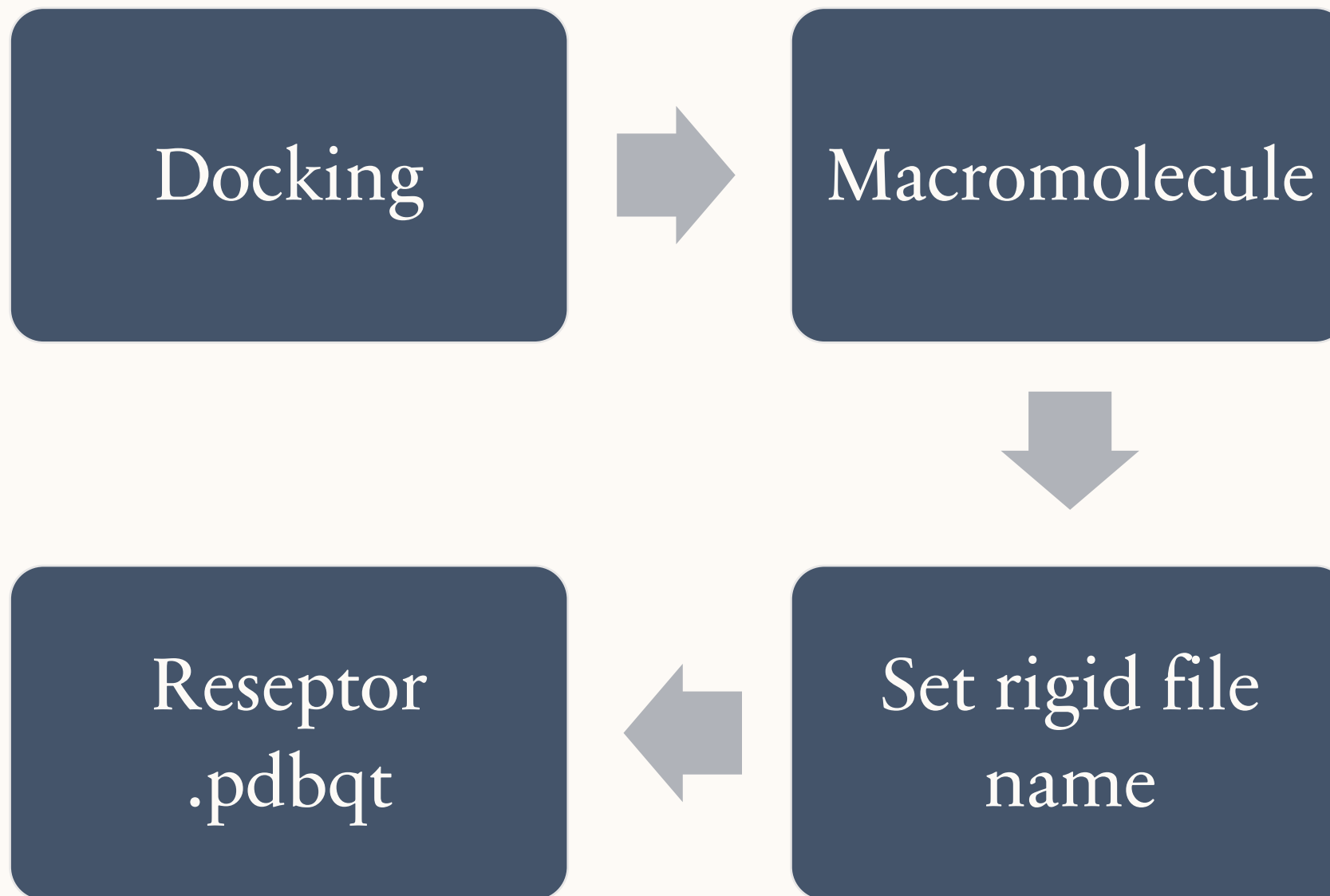
Didapatkan:

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

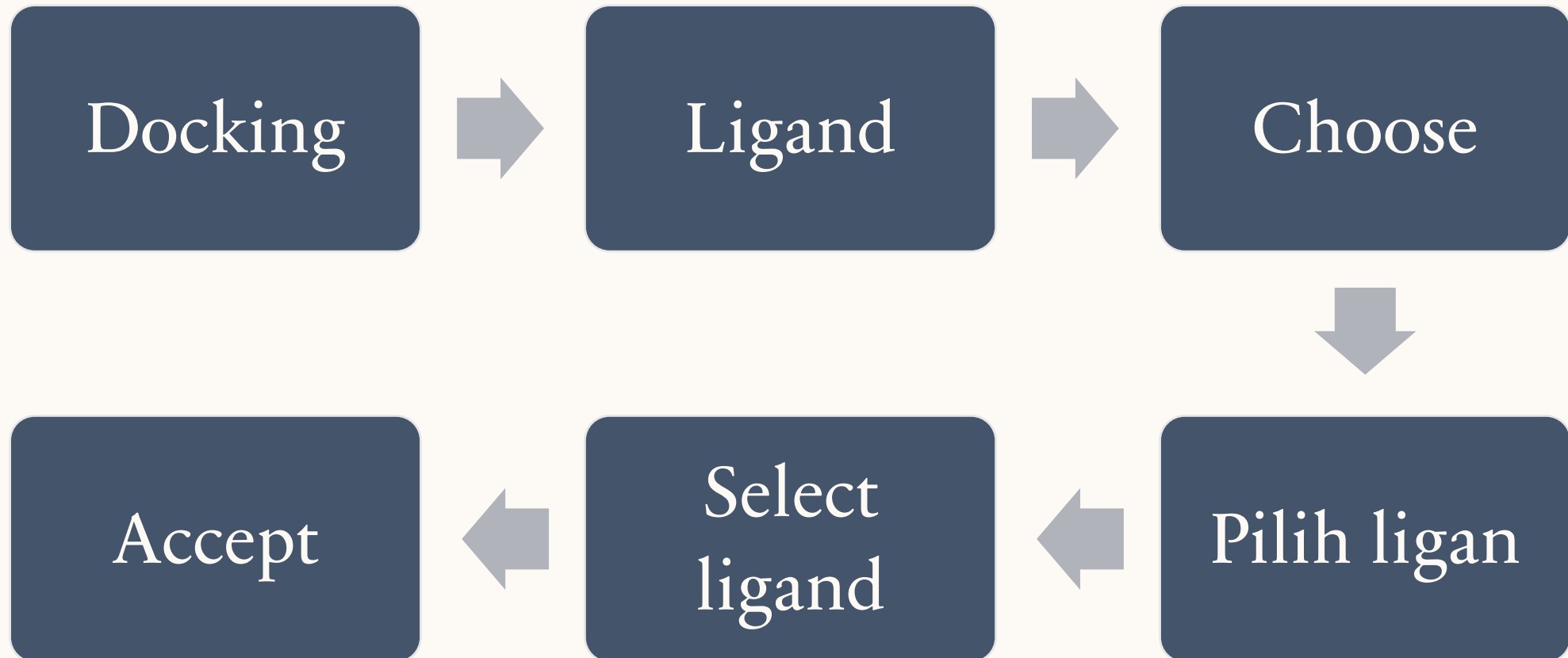
Grid Size (x, y, dan z)

# DOCKING

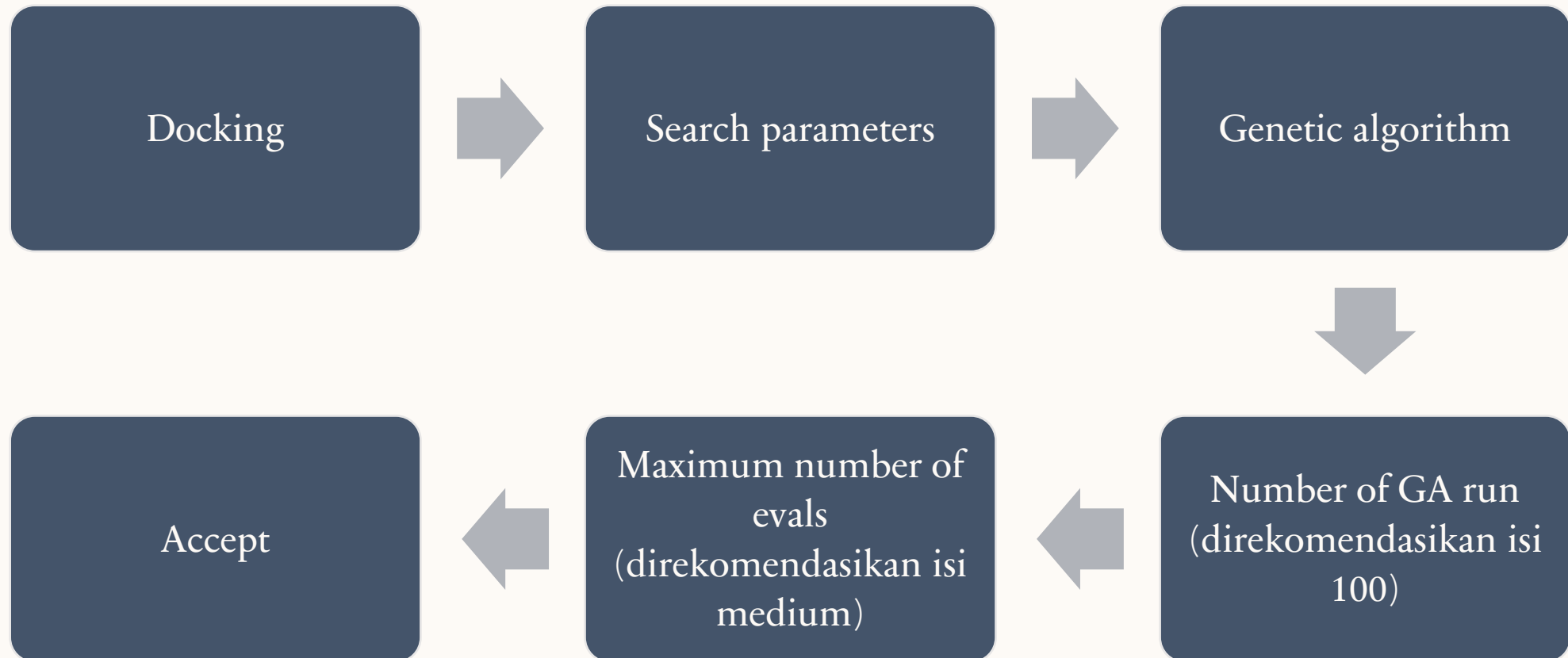
18



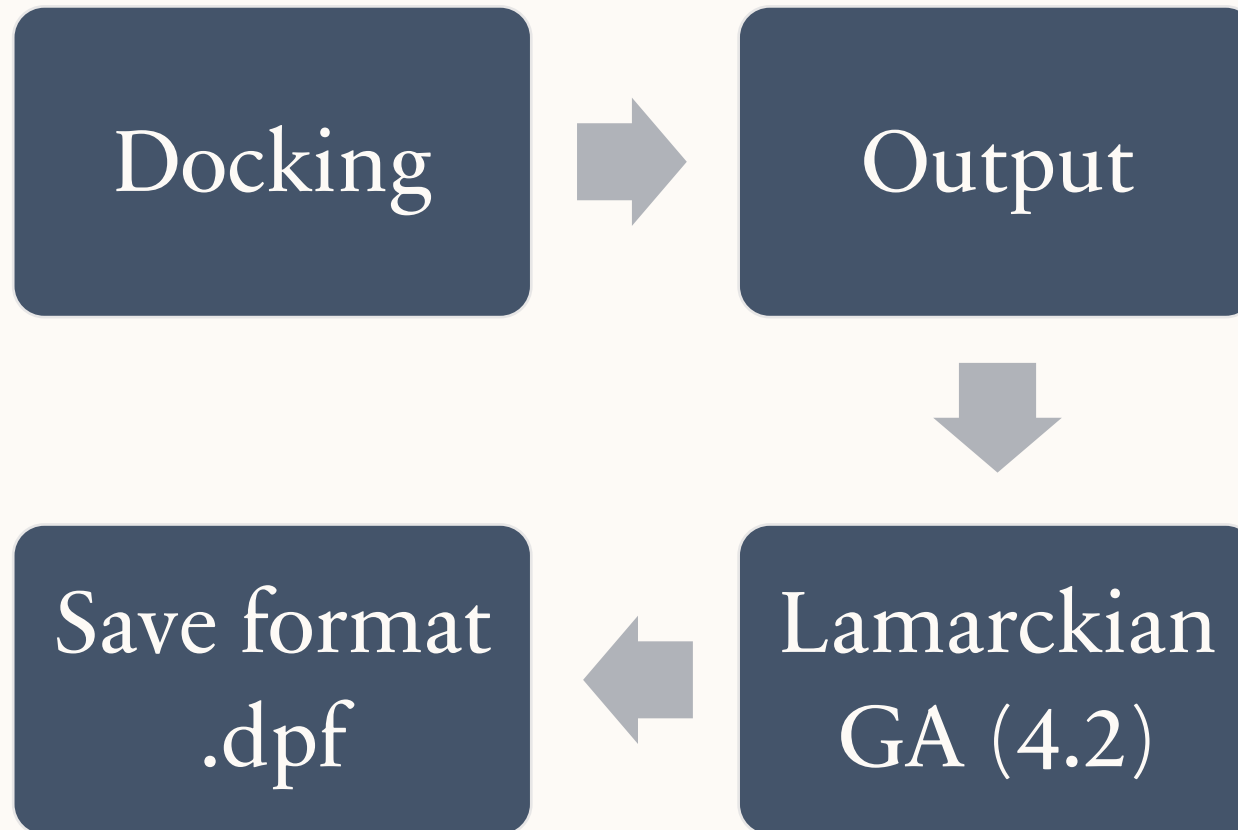
# DOCKING



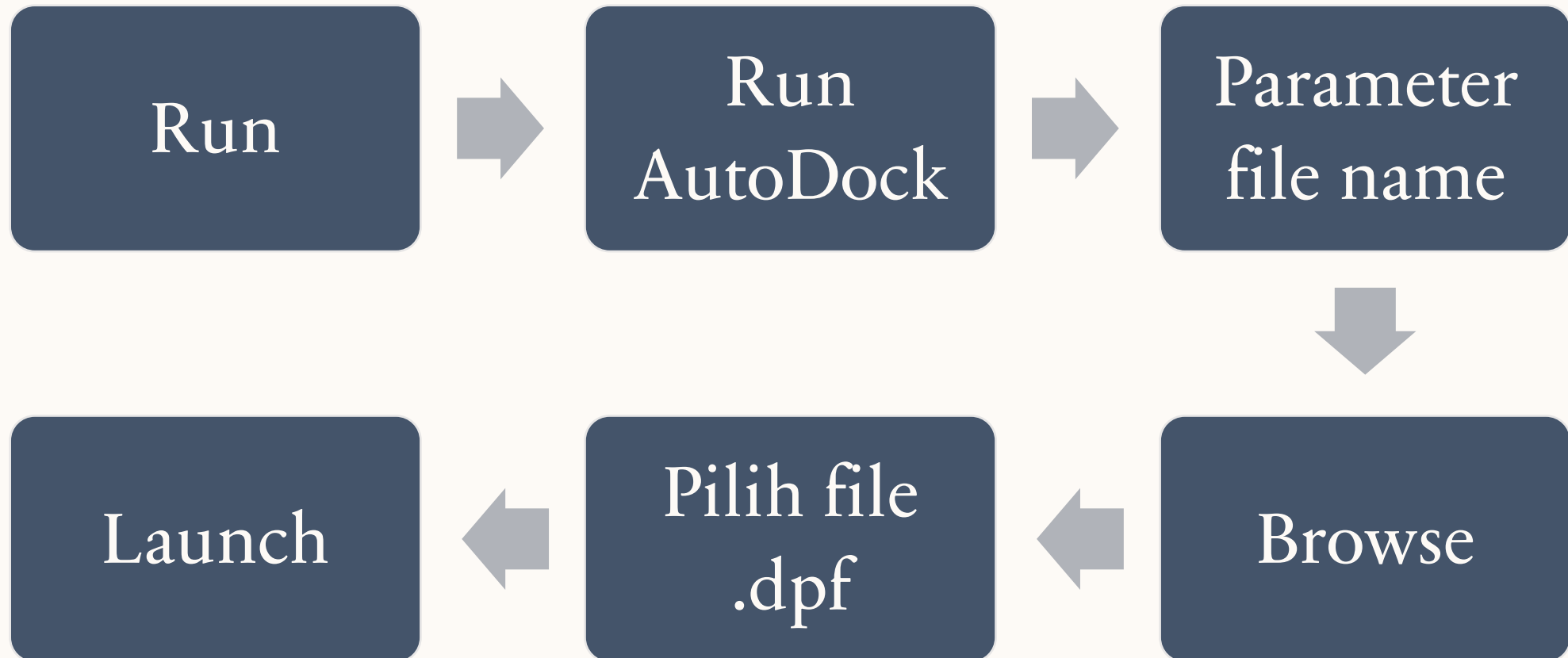
# DOCKING



# DOCKING



## DOCKING



# NOTE

23

- 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**