

NASKAH TUTORIAL

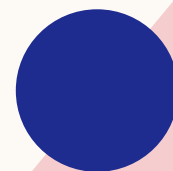
VISUALISASI INTERAKSI RESEPTOR-LIGAN MENGUNAKAN DISCOVERY STUDIO

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

FAKULTAS FARMASI DAN SAINS
PROGRAM STUDI FARMASI
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PROF. DR. HAMKA
JAKARTA
JUNI 2024

DOWNLOAD BIOVIA DISCOVERY STUDIO VISUALIZER

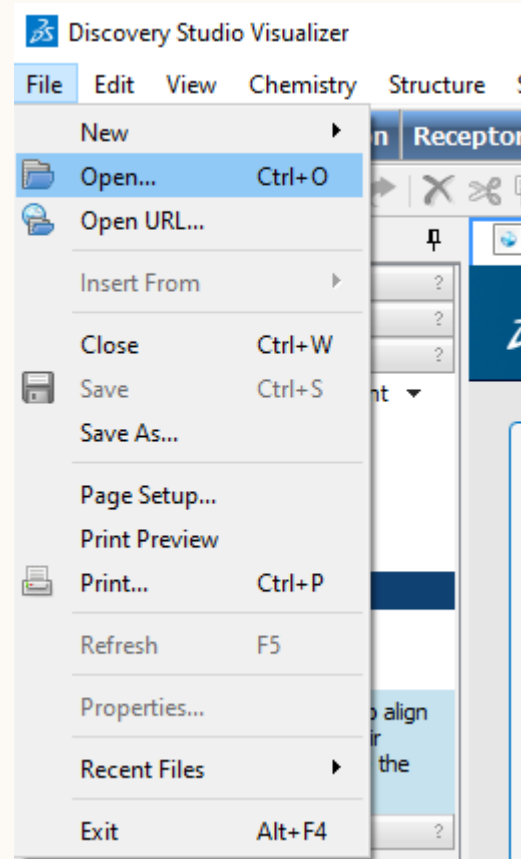
<https://discover.3ds.com/discovery-studio-visualizer-download>



TAHAP VISUALISASI INTERAKSI RESEPTOR-LIGAN

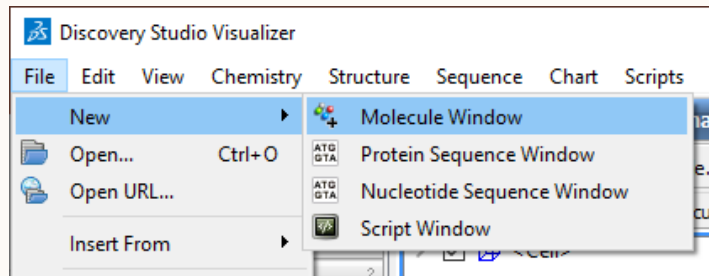
3

1. Buka aplikasi BIOVIA Discovery Studio Visualizer
2. Pilih File → Open → pilih file.pdb reseptor
3. Pilih File → Open → pilih file.pdb ligan

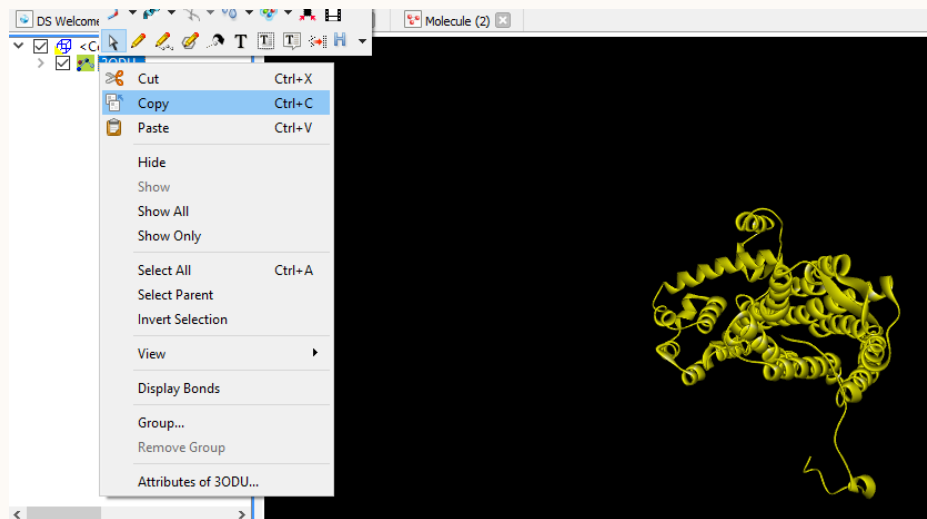


TAHAP VISUALISASI INTERAKSI RESEPTOR-LIGAN

4. Pilih File → New → Molecule Window (untuk membuat window baru)



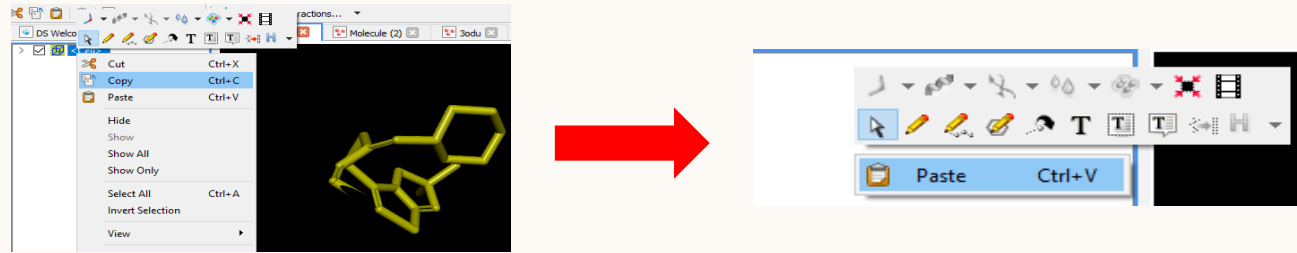
5. Copy reseptor dan paste pada window baru dengan cara klik nama reseptor → klik kanan pada mouse → Copy → buka window baru → klik kanan pada mouse → Paste



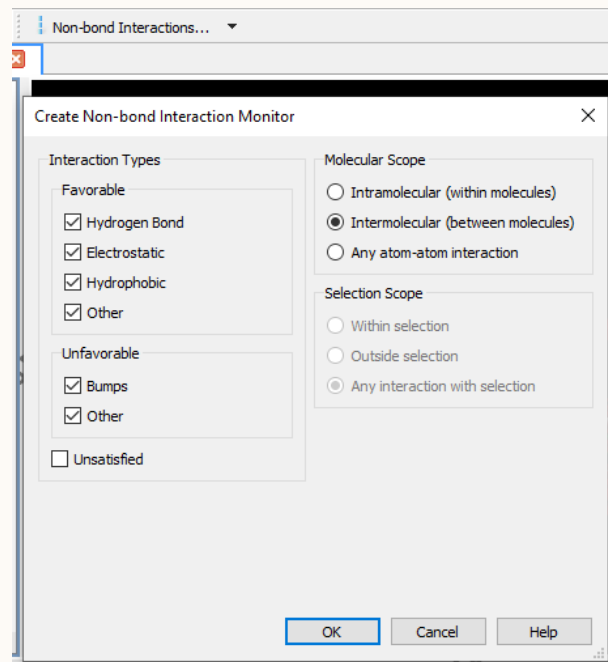
TAHAP VISUALISASI INTERAKSI RESEPTOR-LIGAN

5

6. Copy ligan dan paste pada window baru dengan cara klik nama reseptor → klik kanan pada mouse → copy → buka window baru → klik kanan pada mouse → Paste

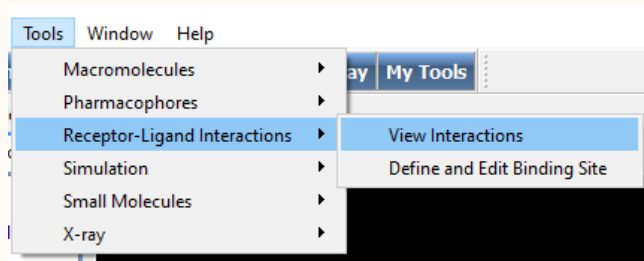


7. Klik Non-Bond Interactions Monitor → checklist tipe interaksi yang ingin dilihat → pilih intermolecular pada Molecular Scope → Ok

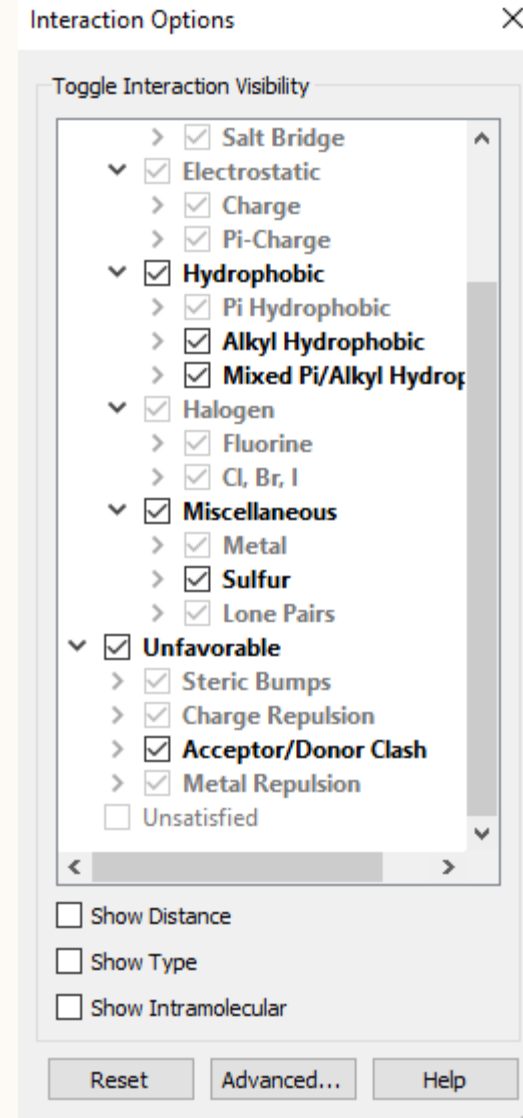
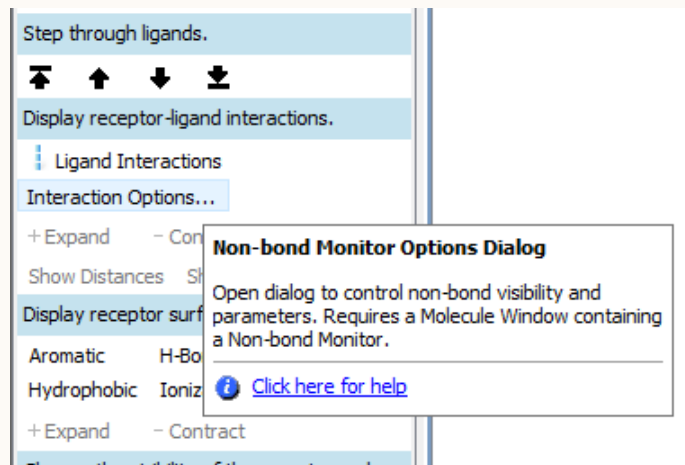


TAHAP VISUALISASI INTERAKSI RESEPTOR-LIGAN

8. Klik Tools → Receptor-Ligand Interactions → View Interactions → Maka akan muncul kolom View Interactions



9. Pada kolom View Interaction, klik Interaction Options → Bisa memilih Show Distance dan/atau Show Type



TAHAP VISUALISASI INTERAKSI RESEPTOR-LIGAN

10. Pada bagian Non-bond terdapat informasi tentang interaksi yang terjadi antara reseptor dan ligan, diantaranya: asam amino yang berikatan dengan ligan, kategori dan tipe ikatan, jarak ikatan dll.

	Name	Visible	Color	Parent	Distance	Category	Types	From	From Chemistry	To	To Chemistry	Angle Deviation	Theta
1	A:ITD1500:S1 - A:GLU288:OE2	☒ Yes		Non-bond...	3,2326	Other	Sulfur-X	A:ITD15...	Sulfur	A:GL...	O,N,S	27,874	79,117
2	A:ITD1500:S2 - A:CYS186:O	☒ Yes		Non-bond...	3,12667	Other	Sulfur-X	A:ITD15...	Sulfur	A:CY...	O,N,S	15,031	87,676
3	A:ITD1500:C3 - A:TYR116	☒ Yes		Non-bond...	3,76833	Hydrophobic	Pi-Sigma	A:ITD15...	C-H	A:TY...	Pi-Orbitals		19,77
4	A:ITD1500:S2 - A:HIS113	☒ Yes		Non-bond...	5,86451	Other	Pi-Sulfur	A:ITD15...	Sulfur	A:HI...	Pi-Orbitals		74,842
5	A:CYS186 - A:ITD1500	☒ Yes		Non-bond...	4,88801	Hydrophobic	Alkyl	A:CYS186	Alkyl	A:IT...	Alkyl		
6	A:TRP94 - A:ITD1500	☒ Yes		Non-bond...	5,08155	Hydrophobic	Pi-Alkyl	A:TRP94	Pi-Orbitals	A:IT...	Alkyl		
7	A:TRP94 - A:ITD1500	☒ Yes		Non-bond...	4,81919	Hydrophobic	Pi-Alkyl	A:TRP94	Pi-Orbitals	A:IT...	Alkyl		
8	A:HIS113 - A:ITD1500	☒ Yes		Non-bond...	5,26182	Hydrophobic	Pi-Alkyl	A:HIS113	Pi-Orbitals	A:IT...	Alkyl		
9	A:ITD1500:S1 - A:GLU288:OE2	☒ Yes		Non-bond...	3,2326	Other	Sulfur-X	A:ITD15...	Sulfur	A:GL...	O,N,S	27,874	79,117
10	A:ITD1500:S2 - A:CYS186:O	☒ Yes		Non-bond...	3,12667	Other	Sulfur-X	A:ITD15...	Sulfur	A:CY...	O,N,S	15,031	87,676
11	A:ITD1500:C3 - A:TYR116	☒ Yes		Non-bond...	3,76833	Hydrophobic	Pi-Sigma	A:ITD15...	C-H	A:TY...	Pi-Orbitals		19,77
12	A:ITD1500:S2 - A:HIS113	☒ Yes		Non-bond...	5,86451	Other	Pi-Sulfur	A:ITD15...	Sulfur	A:HI...	Pi-Orbitals		74,842

ninoAcidChain

AminoAcid

Atom

Bond

ConformerModel

Conformer

Conformer Atom

ConformerBond

Cell

Chain

Residue

Non-bond Monitor

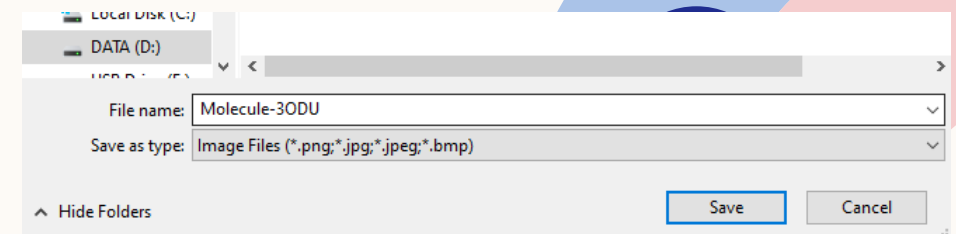
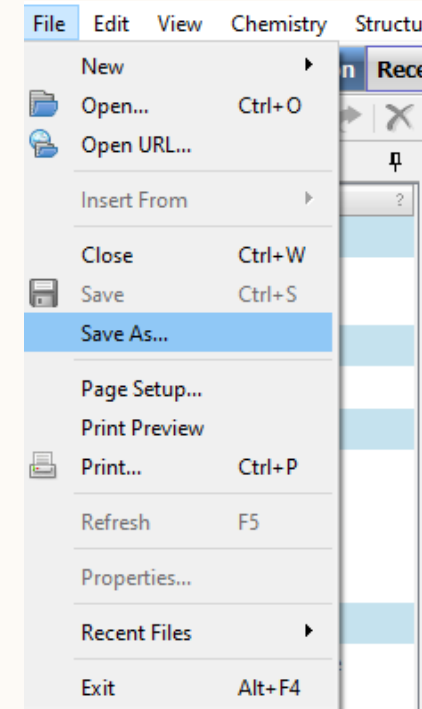
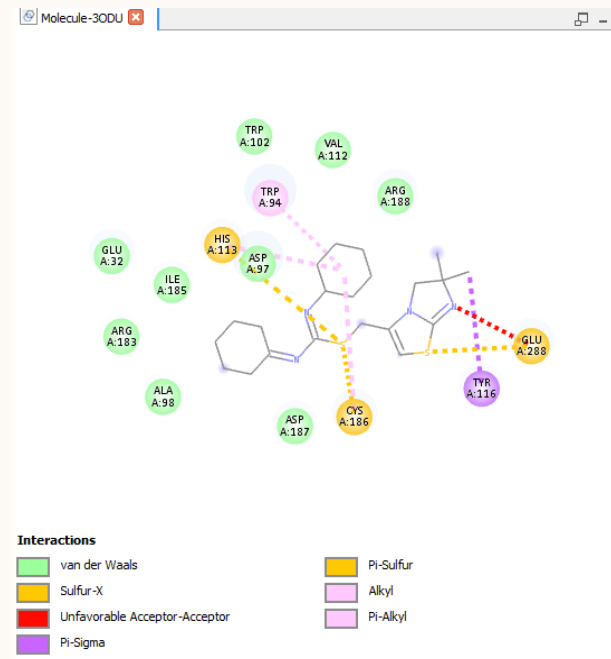
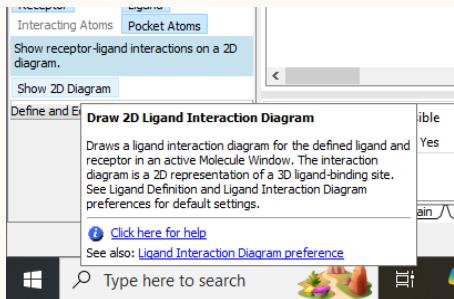
Unfavorable Non-bond

Non-bond

TAHAP VISUALISASI INTERAKSI RESEPTOR-LIGAN

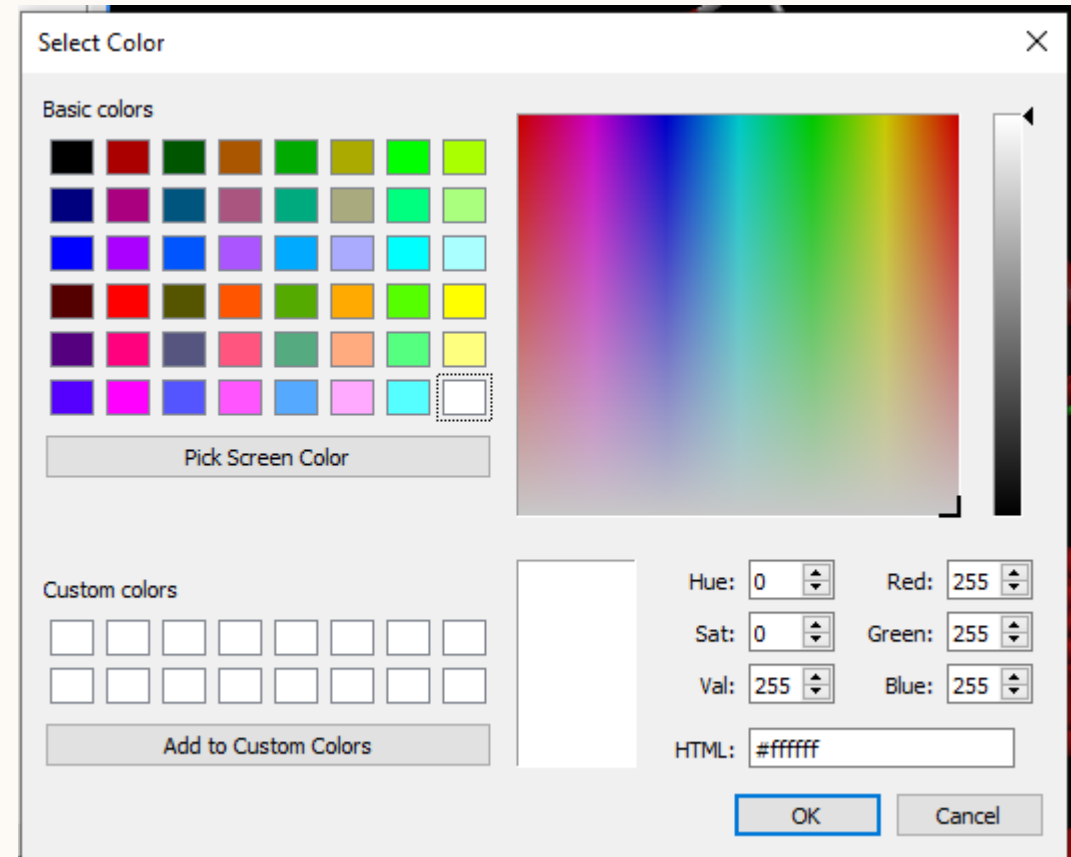
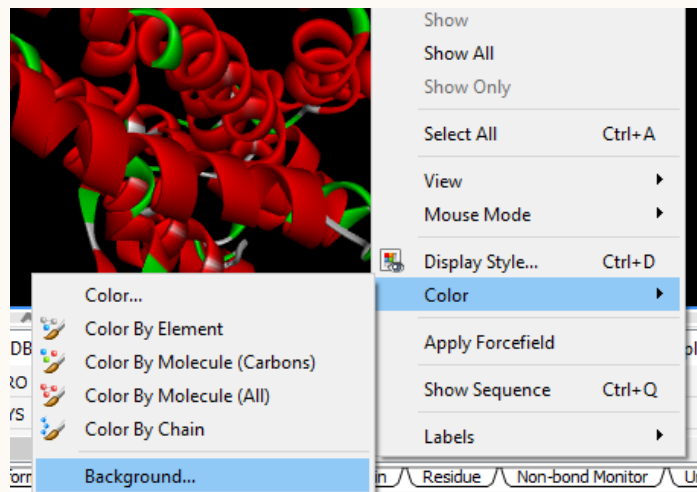
11. Pada kolom View Interaction, klik Show 2D Diagram maka akan muncul window yang berisi interaksi reseptor ligan dalam bentuk 2 dimensi

12. Klik File → Save As → simpan dalam format .png/ .jpg/ .jpeg → Save



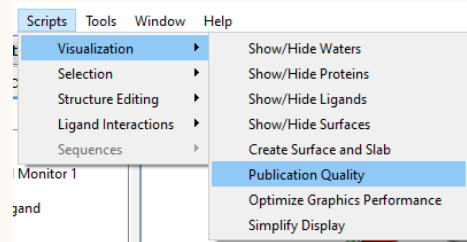
TAHAP VISUALISASI INTERAKSI RESEPTOR-LIGAN

13. Ubah warna background yang berwarna hitam menjadi putih dengan klik kanan pada window kerja → pilih Background → pilih Color → pilih warna putih (sesuai keinginan) → Ok

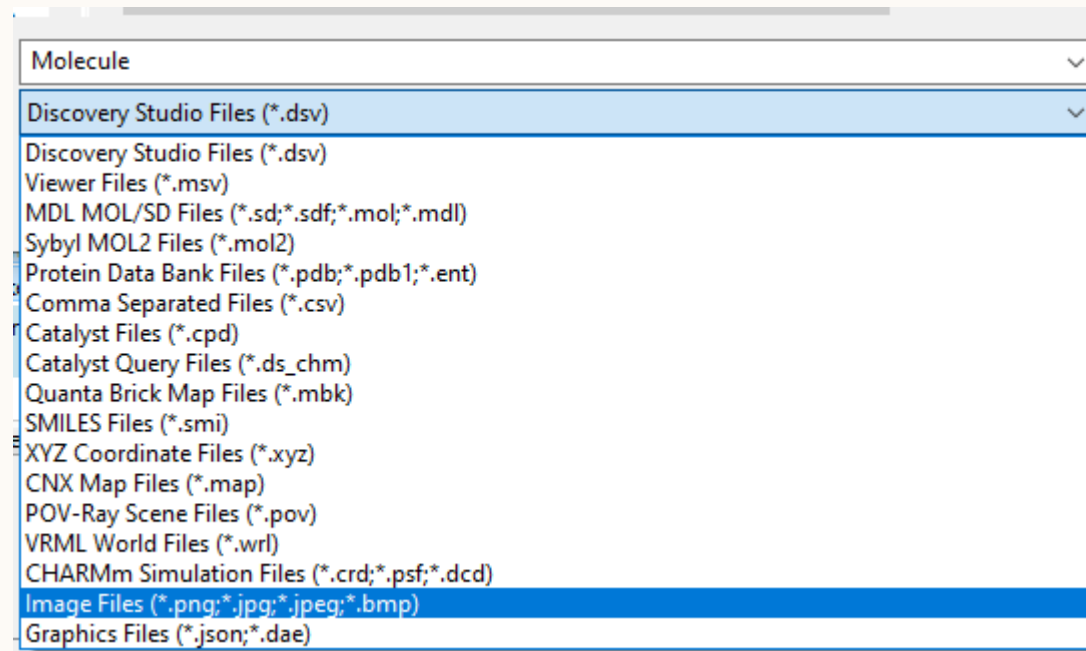
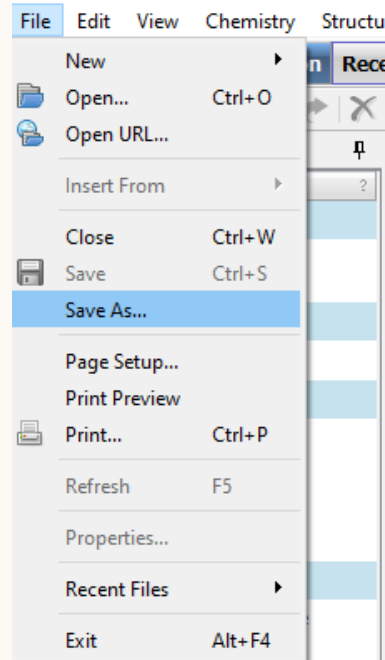


TAHAP VISUALISASI INTERAKSI RESEPTOR-LIGAN

14. Pilih Script → Visualization → Publication Quality

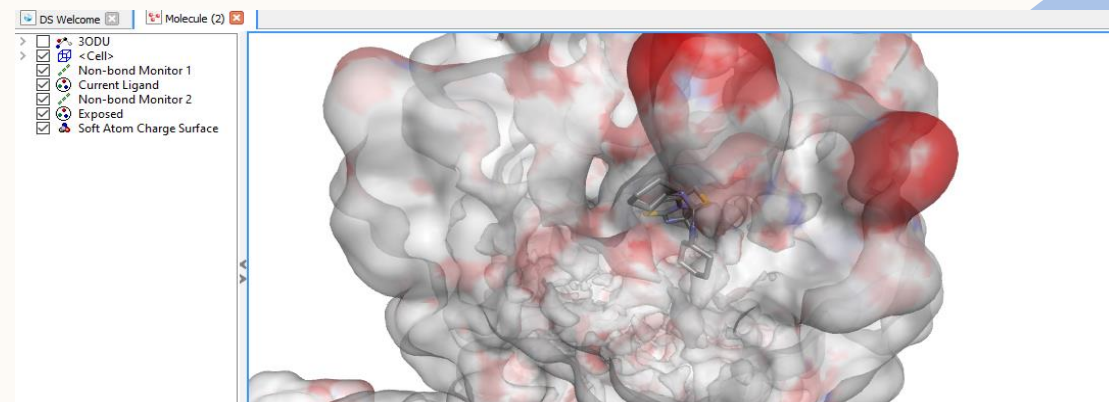
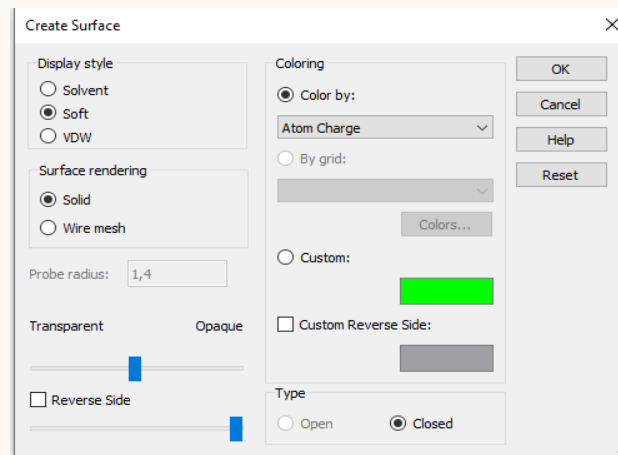
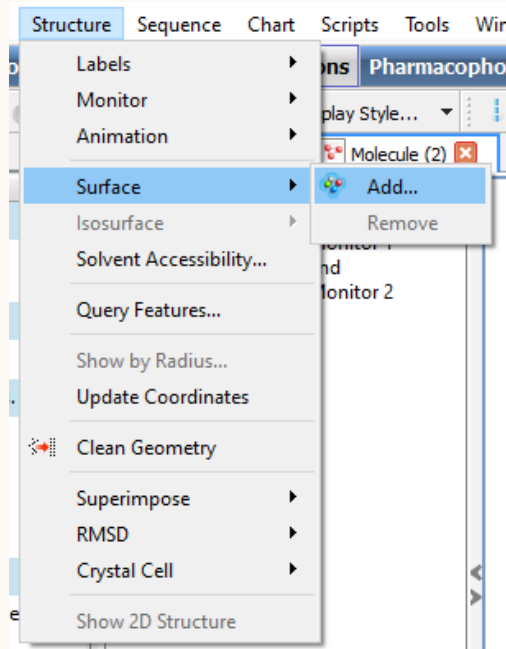


15. Klik File → Save As → simpan dalam format .dsv/ .png/ .jpg/ .jpeg → Save



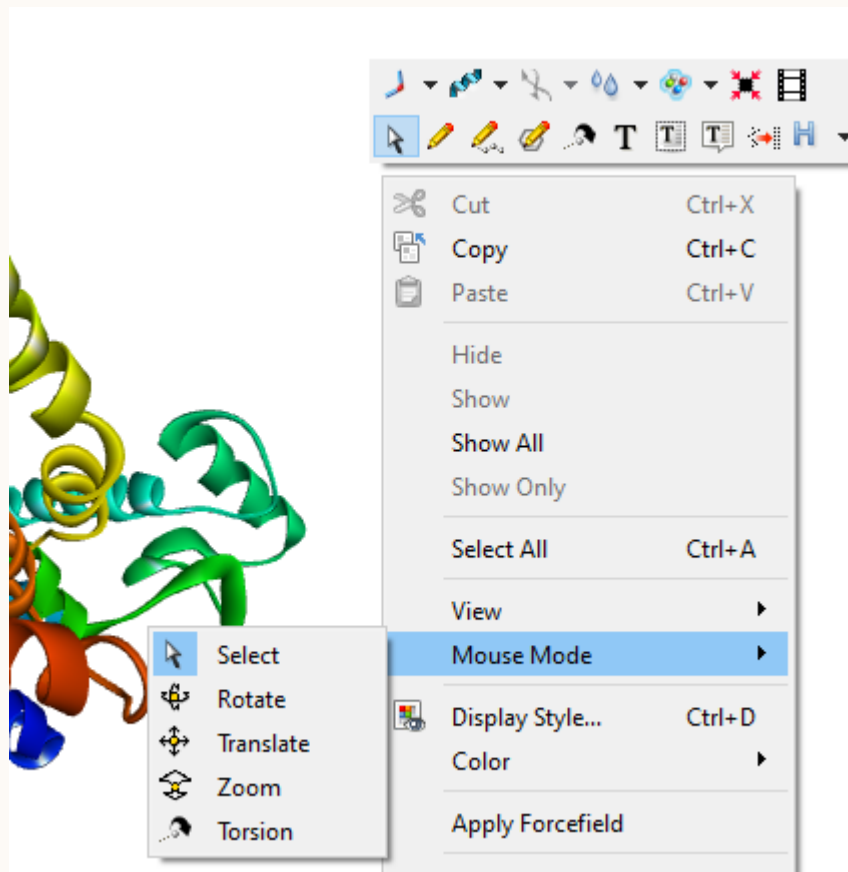
CARA MEMBUAT SURFACE PADA RESEPTOR

1. Klik Structure → Surface → Add
2. Pilih Display style, Surface rendering, dan warna sesuai keinginan serta atur transparansi dari surface → Ok → (Dapat di-save)



CARA MENGUBAH MODE MOUSE UNTUK MELIHAT POSISI LIGAN PADA RESEPTOR 12

Klik kanan pada window kerja → pilih Mouse Mode → Pilih mode yang diinginkan sesuai kebutuhan



**THANK
YOU**