



## AGENDA KEGIATAN WORKSHOP DOCKING & VIRTUAL SCREENING 2018 BATCH II 13 – 14 NOVEMBER 2018

### HARI 1 : SELASA, 13 NOVEMBER 2018

WAKTU	KEGIATAN	PJ	KETERANGAN
08.00 - 08.30	Registrasi Ulang & <i>Coffee Break</i>	TropBRC	
08.30 - 08.45	Pembukaan		
08.45 - 09.00	Penjelasan Workshop	Setyanto	
09.00 - 10.00	Pengenalan Docking & Virtual Screening	<b>Tutor:</b> Setyanto	ADT, Vina, Raccoon
10.00 - 10.15	Foto Bersama		
10.15 - 11.00	Optimasi Geometri & Fragment Molecular Orbital (FMO)	<b>Tutor:</b> Luthfan	Avogadro, wxMacMolPLTGameSS-US, Openbabel, npp
11.00 - 12.00	Instalasi Software	<b>Tutor:</b> Setyanto & Luthfan	
12.00 - 13.00	ISHOMA (Dhuhur 12:01)		
13.00 - 14.30	Praktek Optimasi Geometri	<b>Tutor:</b> Luthfan <b>Asisten:</b> Setyanto	Praktek: - Optimasiligan - Persiapan PDBQT
14.30 - 15.20	Praktek Rigid Docking	<b>Tutor:</b> Setyanto <b>Asisten:</b> Luthfan	
15.20 - 15.50	Break (Ashar 15:23)		
15.50 - 16.30	Praktek Rigid Docking - lanjutan		
16.30 - 17.30	Praktek Flexible Docking	<b>Tutor:</b> Setyanto <b>Asisten:</b> Luthfan	Praktek: Running Rigid & Flexible Docking Pymol - visualize Analisis Energi dan Pose

### HARI 2 : RABU, 14 NOVEMBER 2018

WAKTU	KEGIATAN	PJ	KETERANGAN
07.30 - 08.00	Registrasi Hari 2		
08.00 - 10.00	Praktek Fragment MO	<b>Tutor:</b> Luthfan <b>Asisten:</b> Setyanto	Software: GameSS & FU
10.00 - 10.15	<i>Coffee Break</i>		
10.15 - 12.00	Praktek Virtual Screening	<b>Tutor:</b> Setyanto <b>Asisten:</b> Luthfan	Software: Raccoon Pymol - visualize
12.00 - 13.10	ISHOMA (Dhuhur 12:01)		
13.10 - 14.10	Analisa Hasil Docking	<b>Tutor:</b> Setyanto <b>Asisten:</b> Luthfan	- Ligplot - Perbandingan energy ikat antara hasil vina dan FMO-GameSS-US
14.10 - 15.10	Analisa Hasil FMO	<b>Tutor:</b> Luthfan <b>Asisten:</b> Setyanto	
15.10 - 15.40	Break (Ashar 15:23)		
15.40 - 16.40	Resume, Diskusi dan Mini Proyek	Setyanto & Luthfan	
16.40 - 17.00	Penutupan	TropBRC	