



WORKSHOP VIRTUAL SCREENING AND DOCKING

PENDAHULUAN

Salah satu metode untuk mendapatkan senyawa kimia yang dapat berperan sebagai obat adalah dengan menggunakan metode *trial and error*. Metode ini membutuhkan waktu yang lama dan biaya yang tinggi. Untuk mengurangi *trial and error*, pendekatan *Rational Drug Design* secara komputasi sudah mulai banyak digunakan. Tahap awal dan pada metode ini adalah *virtual screening* dari batch senyawa-senyawa kimia yang tersedia. Proses *virtual screening* pada dasarnya adalah proses *molecular docking* secara cepat untuk mendapatkan nilai afinitas senyawa kimia yang paling kuat. Maka dari itu pengetahuan tentang *docking* molekul mutlak diperlukan.

Banyak peneliti yang telah menggunakan *docking* molekul dalam tahap awal penelitian-nya, namun demikian beberapa masih memiliki kesalahan diantaranya tidak memperhatikan optimasi geometri dari struktur ligan, dan tidak adanya validasi dengan simulasi dinamika molekul atau validasi dengan metode *ab initio*.

Pada workshop kali ini akan diperkenalkan optimasi geometri sebelum *docking* molekul dan mengenal *fractal molecular orbital* sebagai nilai pembanding dari hasil *docking* dengan *autodock vina*

TUJUAN

1. Peserta memperoleh pengetahuan mengenai *docking* molekul, *virtual screening*, optimasi geometri dan *fractal molecular orbital* sebagai nilai pembanding hasil *docking*.
2. Peserta mampu melakukan mini proyek untuk *docking* molekul.

MATERI

1. *Rigid & Flexible Docking* dengan menggunakan *Autodock Vina*
2. Optimasi Geometri dengan menggunakan *Avogadro* dan *Gamess-US*
3. *Virtual Screening* dengan menggunakan *Autodock Raccoon*
4. *Fractal Molecular Orbital (FMO)* dengan menggunakan *Facio* dan *Gamess-US*
5. *Mini Project*

PEMBICARA



Dr. Setyanto Tri Wahyudi, M.Si



Luthfan Irfana, S.Si, M.Si

24-25
JULI 2018

R. Coklat
Trop BRC,
Kampus IPB
Taman
Kencana

08.00- 17.00
WIB

Fasilitas:
USB Materi,
Sertifikat,
Makan Siang,
Snack Pagi &
Sore

Biaya:
Rp 2.500.000
(NET)
(di luar
akomodasi &
transportasi)

Info Kegiatan 2018

- Agustus: HPLC Fingerprint Analysis
- September: Desain Eksperimen Lanjutan
- Oktober: Teknik Bioasai
- November: Bioinformatika (NGS)

PEMBAYARAN

dapat melalui rekening:

Bank : BNI Bogor
No : 3898272
Nama : REKTOR IPB
c.q. BIOFARMAKA LPPM

mohon dapat mengirimkan bukti pembayaran ke kami via email
bfarmaka.seminar@gmail.com

Info lebih lanjut:
<http://bit.ly/docking2018>
*hanya untuk 15 peserta

