

BAB IV

METODOLOGI PENELITIAN

4.1 Jenis Penelitian

Pada penelitian ini digunakan penelitian eksperimental laboratoris secara *In silico* dengan komputer menggunakan perangkat lunak *Autodock*, *Avogadro*, *pkCSM online tool* dan *Protein.plus web server*. Penelitian dilakukan pada beberapa senyawa turunan asam 5-bromo-O-benzoil salisilat (2) dengan target yaitu enzim COX-2.

4.2 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian dilakukan di Laboratorium Kimia Terpadu Fakultas Ilmu Kesehatan Universitas Muhammadiyah Malang dalam jangka waktu 3 bulan..

4.3 Variabel Penelitian

4.3.1 Variabel Bebas

Variabel bebas yang dipakai pada penelitian ini yaitu struktur 2D dan 3D dari 5 senyawa turunan asam 5-bromo-O-benzoil salisilat (2) yaitu 4-klorobenzoil, 4-metoksibenzoil, 3-klorobenzoil, 4-dimetilamino, 3,5-bis-trifluorometil dan struktur dari enzim COX-2 yang saling terhubung dengan seloksib.

4.3.2 Variabel terikat

Pada penelitian variabel terikat yang digunakan adalah nilai energi ikatan, nilai hidrogen, nilai RMSD, berat molekul (BM), Logaritma koefisien partisi oktanoil/air (Log P), *Hydrogen bond acceptors* (HBA), *Hydrogen bond donors* (HBD), prediksi sifat farmakokinetika berupa data absorpsi (*Caco₂ permeability*, *human intestinal absorption* dan *skin permeability*), distribusi (*BBB permeability*, *CNS permeability*, *VDss*), metabolisme (*CYP2D6 substrat* dan *inhibitor*), eksresi (*total clearance* dan *renal OTC2 substrate*), data prediksi toksisitas (*LD50*, *LOAEL*, dan *Hepatotoxicity*).

4.4 Bahan Penelitian

4.4.1 Senyawa Turunan asam 5-bromo-O-benzoil salisilat (2)

Tabel 4. 1 Senyawa turunan asam 5-bromo-O-benzoil salisilat (2)

No.	Bahan baku reaksi		Hasil
	Bahan 1	Bahan 2	
1.	asam 5-bromo salisilat	Benzoil klorida	Asam-5-bromo-O-benzoil salisilat
2.		4-klorobenzoil	Asam 5-bromo-O-(4- klorobenzoil)-salisilat
3.		4-metoksibenzoil	Asam 5-bromo-O-(4- metoksibenzoil)-salisilat
4.		3-klorobenzoil	Asam 5-bromo-O-(3- klorobenzoil)-salisilat
5.		4-dimetilamino	Asam 5-bromo-O-(4- dimetilamino)-salisilat
6.		3,5-bis- trifluorometil	Asam 5-bromo-O-(3,5-bis- trifluorometil)-salisilat

4.4.2 Protein Target

Prasyarat untuk melakukan analisis *molecular docking* adalah menganalisis protein target atau reseptor menggunakan *software Autodock*. Protein target yang digunakan berupa enzim COX-2 yang didapatkan dari *Protein Data Bank* (PDB) dengan kode 3LN1.

4.5 Alat Penelitian

4.5.1 Perangkat Keras

Pada penelitian ini digunakan perangkat keras ASUS Laptop-AINJ251G dengan *processor* Intel(R) Core(TM) i3-1005G1 CPU @1.20GHz 1.19 GHz; *Operating system* : Windows 10 Home Single Language 64-bit; *Memory*: 4GB RAM.

4.5.2 Perangkat Lunak

Pada penelitian ini digunakan perangkat lunak diantaranya:

1. *Marvin Sketch* 20.11
2. *Avogadro* seri 1.0.1
3. *Biovia Discovery Studio* 2021

4. *Autodock PyRx* seri 0.8
5. XTB

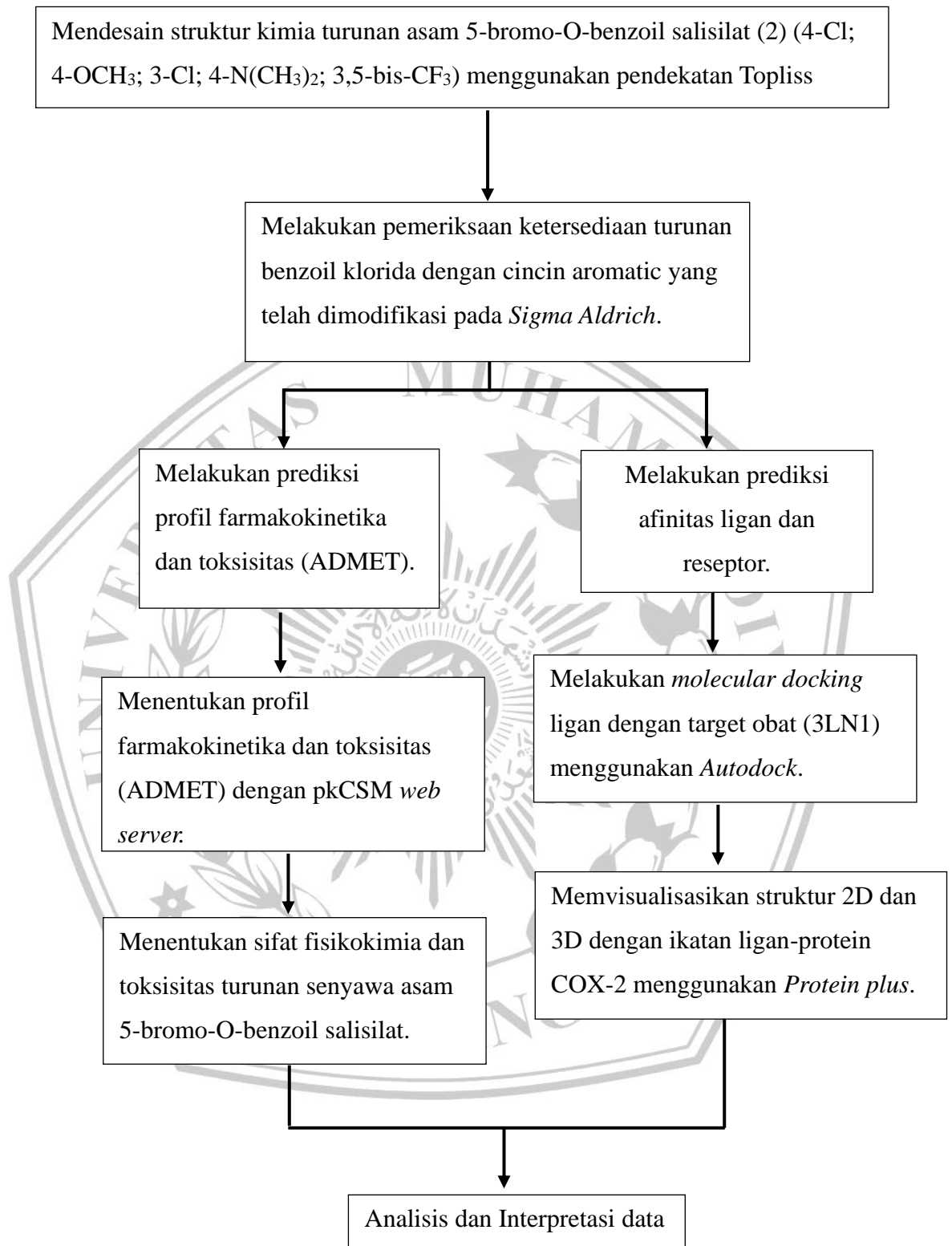
4.5.3 Database

Data base yang digunakan dalam penelitian ini:

1. *Protein Data Bank* (PDB) (<https://www.rcsb.org/>)
2. *Protein plus* (<https://proteins.plus/>)
3. *pkCSM Online Tool* (<http://biosig.unimelb.edu.au/pkcsml/prediction>)
4. *SMILES Online Translator* (<https://cactus.nci.nih.gov/translate/>)



4.6 Kerangka Operasional Penelitian



Gambar 4. 1 Kerangka operasional penelitian

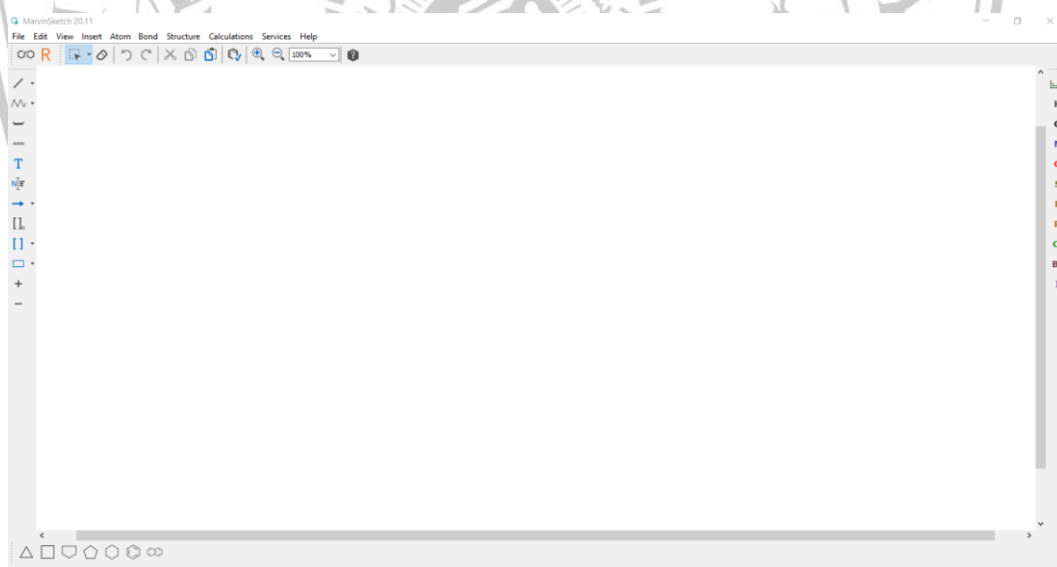
4.7 Prosedur Penelitian

4.7.1 Preparasi Senyawa dan Reseptor

Pada tahap awal penelitian ini dilakukan pemilihan 5 turunan senyawa asam 5-bromo-O-benzoil salisilat berdasarkan pendekatan Topliss. Pendekatan Topliss dilakukan dengan menentukan gugus atau substituen yang digunakan untuk modifikasi struktur pada cincin aromatis. Selanjutnya untuk memeriksa tersedianya struktur turunan dari bahan baku dalam membentuk benzoil klorida dapat diakses situs *Sigma Aldrich*. Kemudian mengakses PDB untuk mencari reseptor satu golongan obat analgesik dan mengunduh ligan yang kompleks. Pada tahap preparasi, digunakan *Marvin Sketch* 20.11 untuk menggambar senyawa turunan dalam bentuk struktur kimia 2D dan melalui program *Avogadro software* menggunakan gambar struktur kimia 3D. Berikut penjelasan langkah-langkah preparasi senyawa dan reseptor:

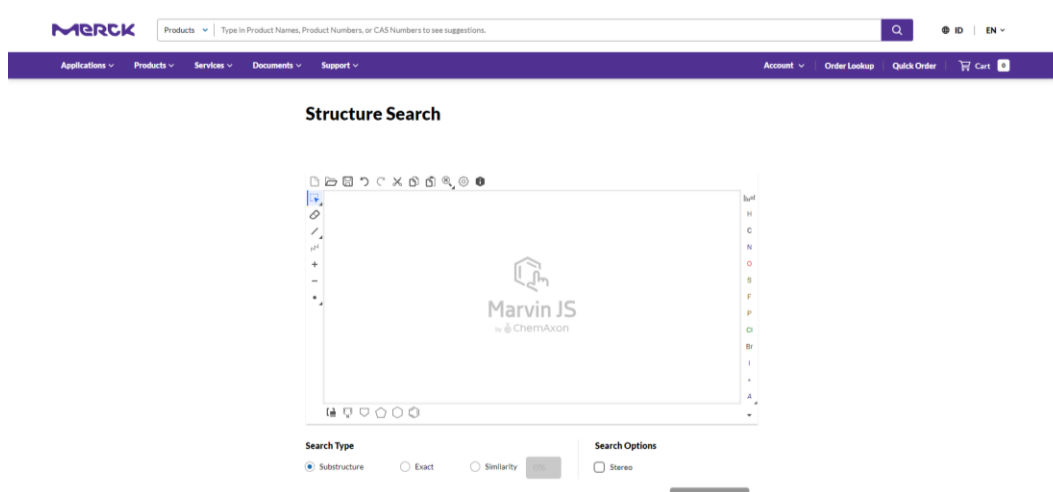
a. *Marvin Sketch*

1. Membuka aplikasi *Marvin Sketch* kemudian pada fitur *Tool Pallete* struktur senyawa yang telah ditentukan digambar secara manual.



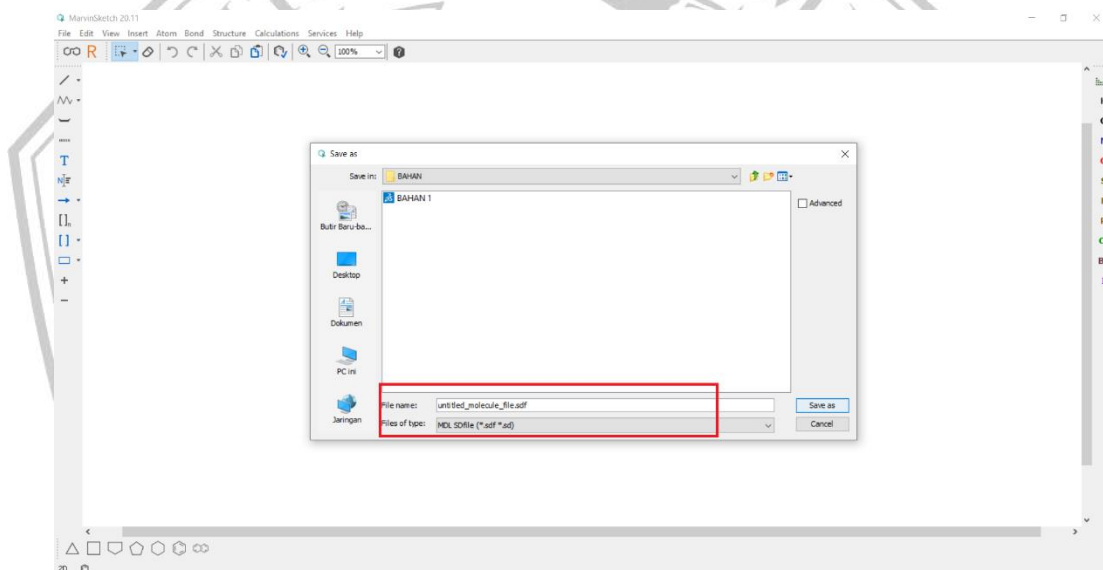
Gambar 4. 2 Langkah pertama pada *marvin sketch*

2. Melakukan modifikasi struktur benzoil klorida yaitu pada cincin aromatic dengan metode Topliss.
3. Membuka situs web *Sigma-Aldrich* untuk memeriksa senyawa benzoil klorida yang cincin aromatikny telah dimodifikasi.



Gambar 4. 3 Langkah ketiga pada *marvin sketch*

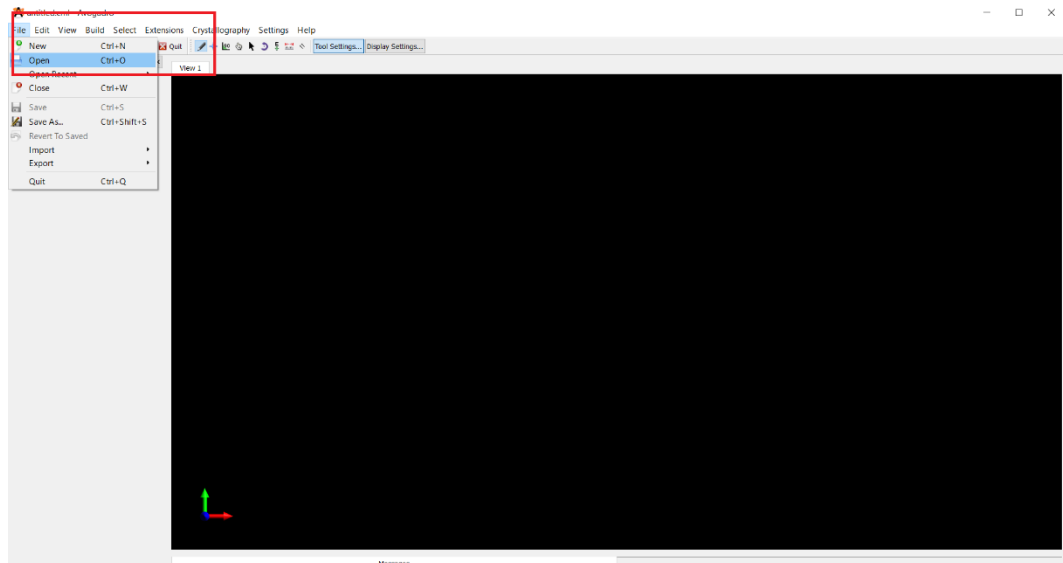
4. Gambar struktur yang selesai dibuat disimpan dalam format *.sdf.



Gambar 4. 4 Langkah keempat pada *marvin sketch*

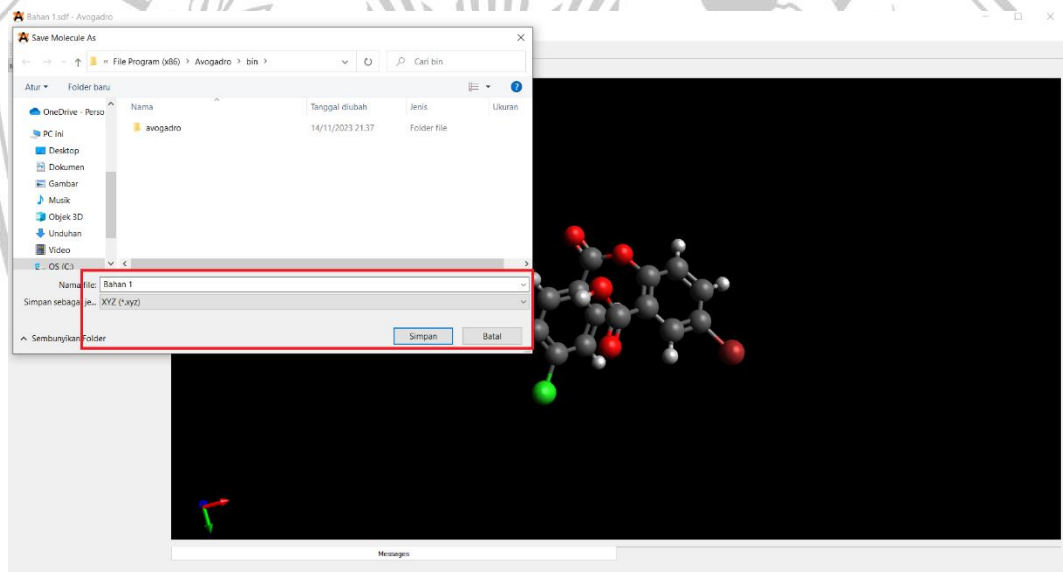
b. *Avogadro software*

1. Membuka aplikasi *Avogadro*, masukkan file yang telah disimpan dari *Marvin Sketch* dengan format *.sdf. Pada aplikasi *Avogadro* struktur kimia 2D diubah menjadi struktur kimia 3D.



Gambar 4. 5 Langkah pertama pada *avogadro*

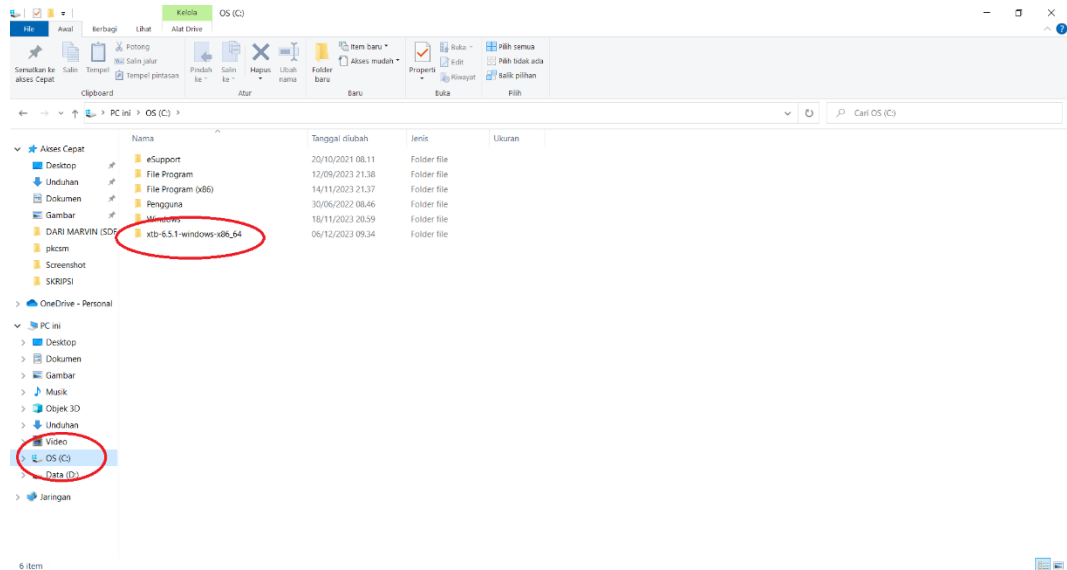
2. Setelah struktur tampak pada layar, kemudian file disimpan dalam format *.xyz.



Gambar 4. 6 Langkah kedua pada *avogadro*

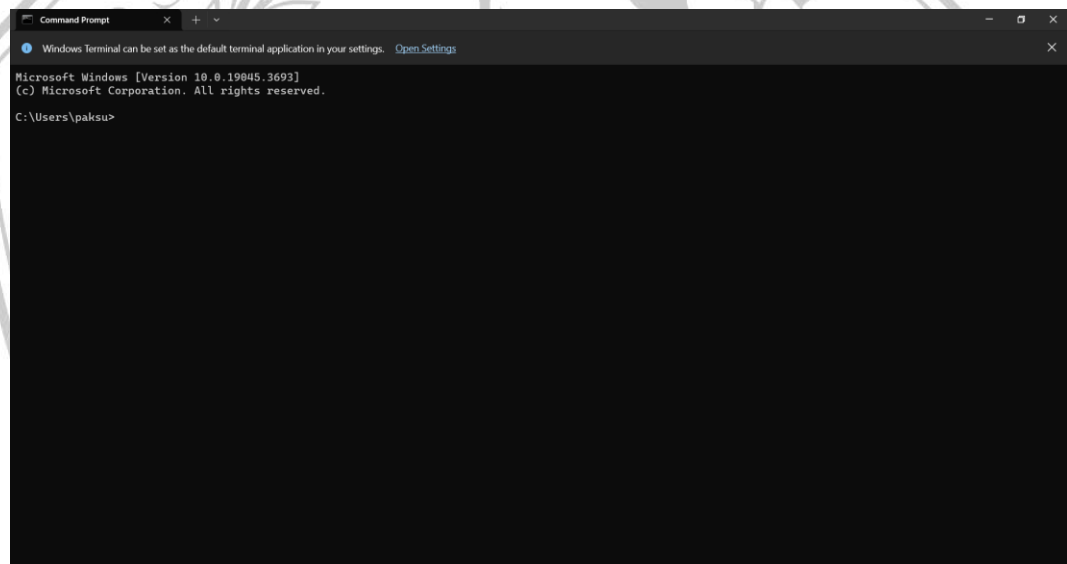
c. XTB Document Calculation

1. File yang telah disimpan dengan format *.xyz selanjutnya disimpan pada folder penyimpanan laptop :C.



Gambar 4. 7 Langkah pertama pada xtb

2. Kemudian dibuka *Command Prompt*.



Gambar 4. 8 Langkah kedua pada xtb

3. Pada lembar kerja ketik `*cd/ d C :`, lalu tekan enter. Selanjutnya ketik `*cd..`, lalu tekan enter (ulangi 2x). Ketik `*xtb/bin` kemudian tekan enter. Ketik `*xtb namafile.sdf – ohess`, lalu tekan enter.


```

Microsoft Windows [Version 10.0.19041.450]
(c) 2020 Microsoft Corporation. All rights reserved.

C:\Users\WINDOWS 10>cd /d C:
C:\Users\WINDOWS 10>cd ..
C:\Users>cd ..
C:\>cd xtb/bin
C:\XTB\bin>xtb C4.xyz --ohess_

```

Gambar 4. 9 Langkah ketiga pada xtb

4. Didapatkan hasil *energy minimize* dan *total energy* senyawa.

```

Command Prompt

::: THERMODYNAMIC ::
::: total free energy -69.965434331686 Eh ::
::: total energy -70.029428414655 Eh ::
::: zero point energy 0.116275466564 Eh ::
::: G(RRHO) w/o ZPVE -0.052281383595 Eh ::
::: G(RRHO) contrib. 0.063994082969 Eh ::
::: optimized geometry written to: xtbopt.xyz

TOTAL ENERGY -70.029428414655 Eh
TOTAL ENTHALPY -69.890027233718 Eh
TOTAL FREE ENERGY -69.965434331686 Eh
GRADIENT NORM 0.000912227787 Eh/Å
HOMO-LUMO GAP 0.100074390853 eV

[WARNING] Runtime exception occurred
-2- restart_readRestart: Dimension mismatch in restart file.
-1- restart_readRestart: Number of electron mismatch in restart file.

* finished run on 2023/12/06 at 10:52:49.985

```

Gambar 4. 10 Langkah keempat pada avogadro

5. Hasil akan tersimpan pada folder XTB dengan format *.xyz, kemudian file tersebut dibuka pada aplikasi avogadro dan disimpan dalam format *.pdb.

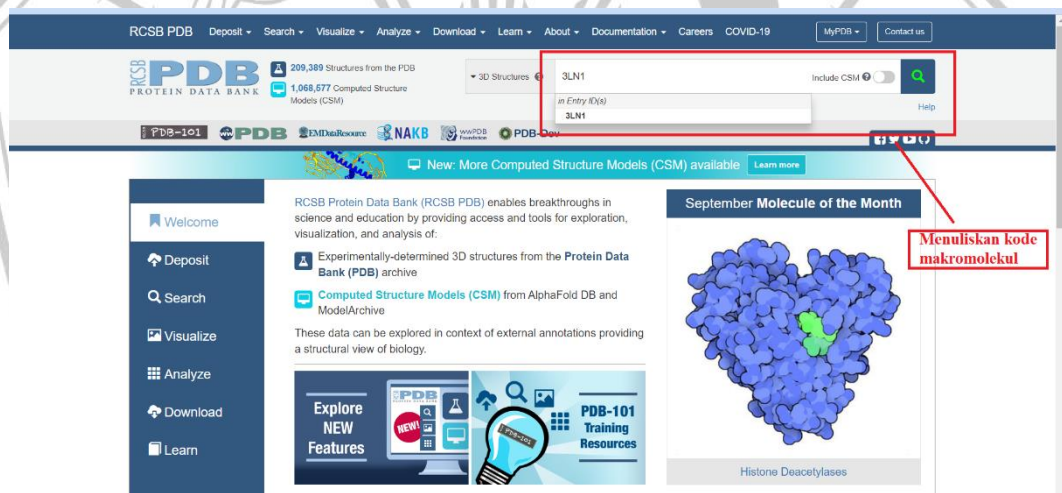
d. Protein Data Bank (PDB)

1. Mengakses (<https://www.rcsb.org/>) untuk menemukan ligan dan protein target obat golongan analgesik dalam makromolekul.



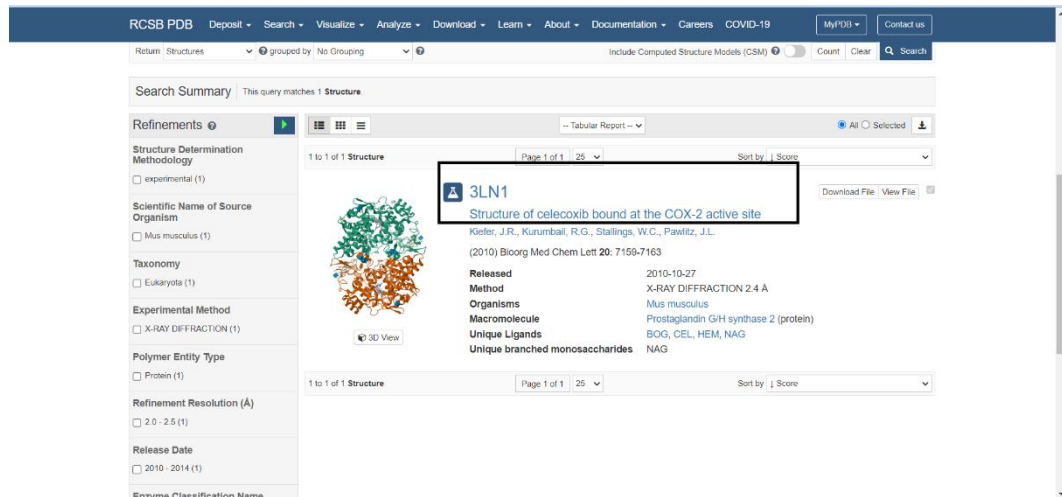
Gambar 4. 11 Langkah pertama pada PDB

2. Pada kolom pencarian klik tombol *search* , kemudian kode makromolekul yang telah ditemukan dalam literatur jurnal (misalnya 3LN1 atau 3ln1) dituliskan pada tombol tersebut.



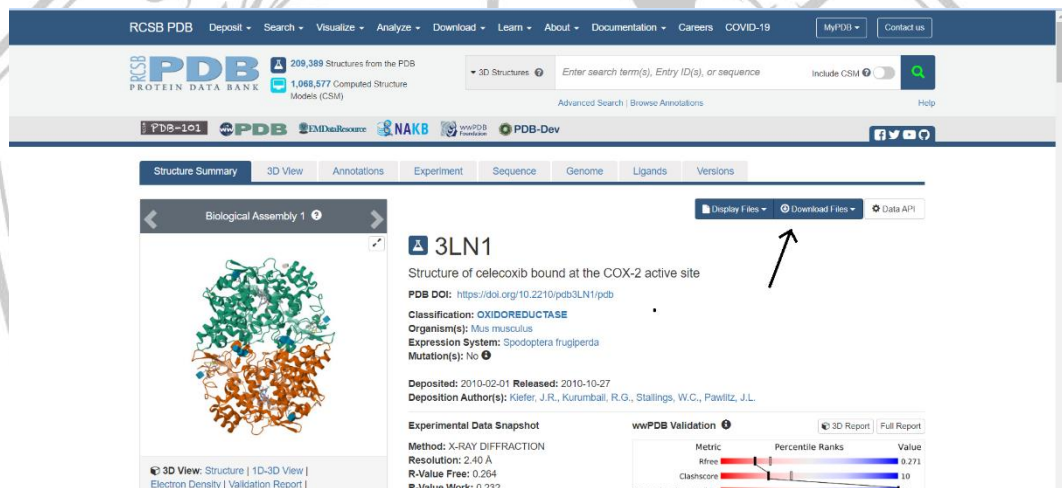
Gambar 4. 12 Langkah kedua pada PDB

3. Mengamati hasil penemuan dan memastikan protein target sesuai dengan senyawa obat.



Gambar 4. 13 Langkah ketiga pada PDB

4. Dibagian pojok kanan atas klik tombol *download*, simpan file dengan format *.pdb.



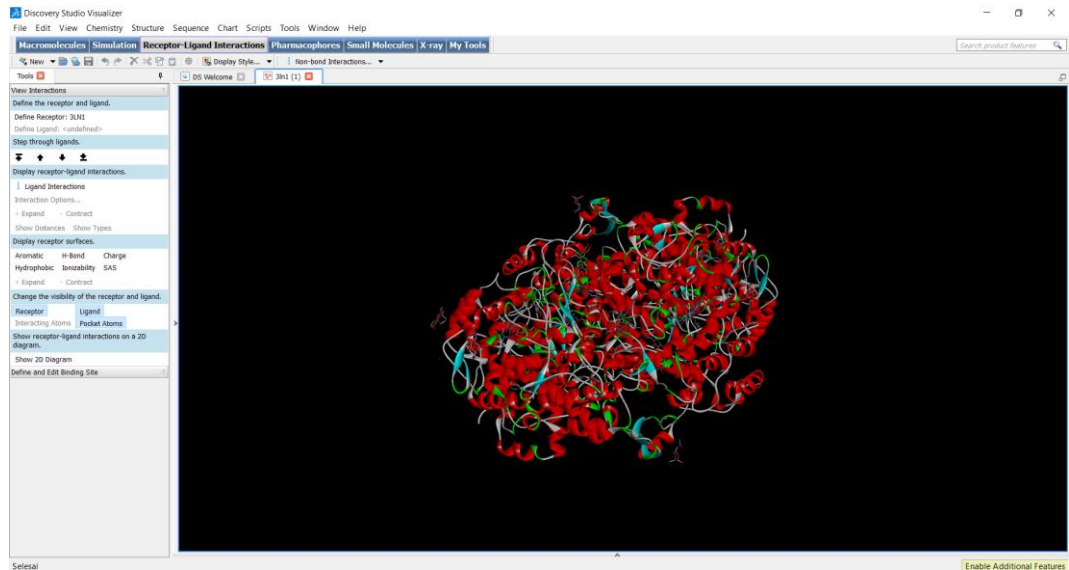
Gambar 4. 14 Langkah keempat pada PDB

4.7.2 Prediksi Afinitas Ligan-Reseptor

4.7.2.1 Pemisahan Ligan dengan Reseptor

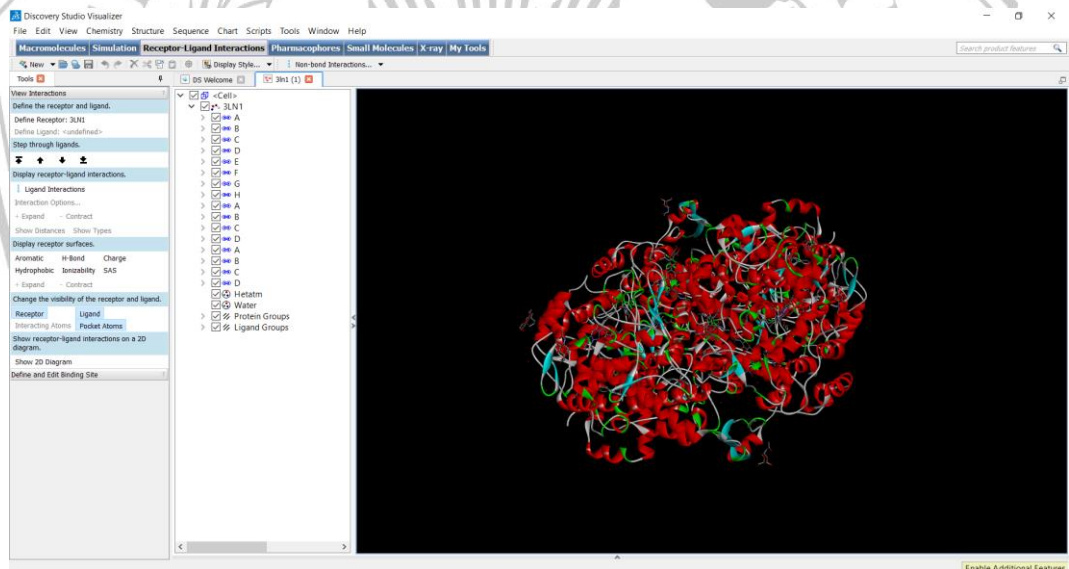
a. Pemilihan Ligan

1. Aplikasi *Discovery Studio* dibuka, masukkan file PDB yang telah diunduh kemudian muncul gambar 3D.



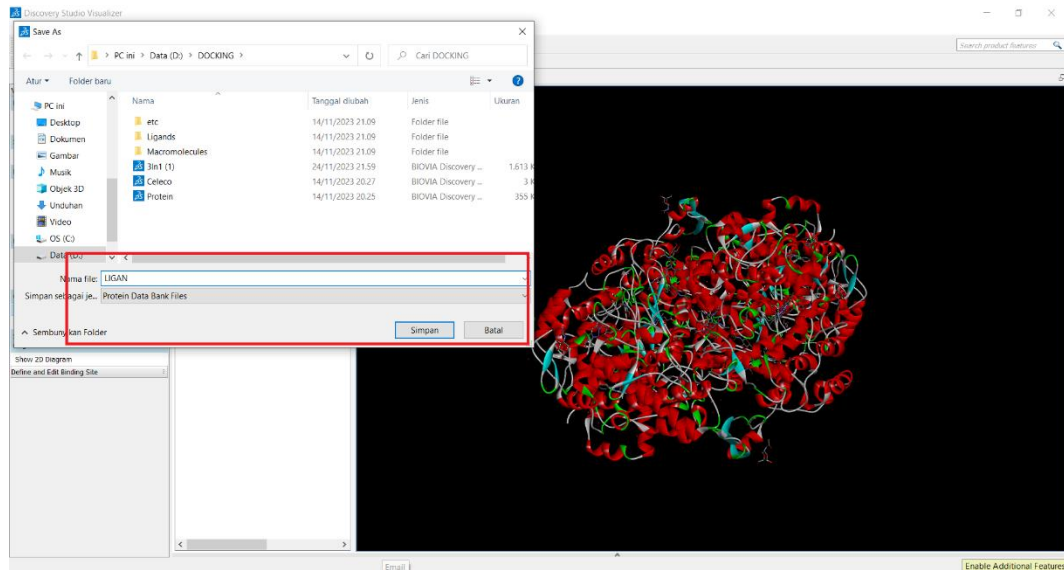
Gambar 4. 15 Langkah pertama pada tahap pemilihan ligan

2. Pada bagian atas klik *view*, pilih *Hierarchy* lalu dipilih unsur ligan yang terdapat pada layar.



Gambar 4. 16 Langkah kedua pada tahap pemilihan ligan

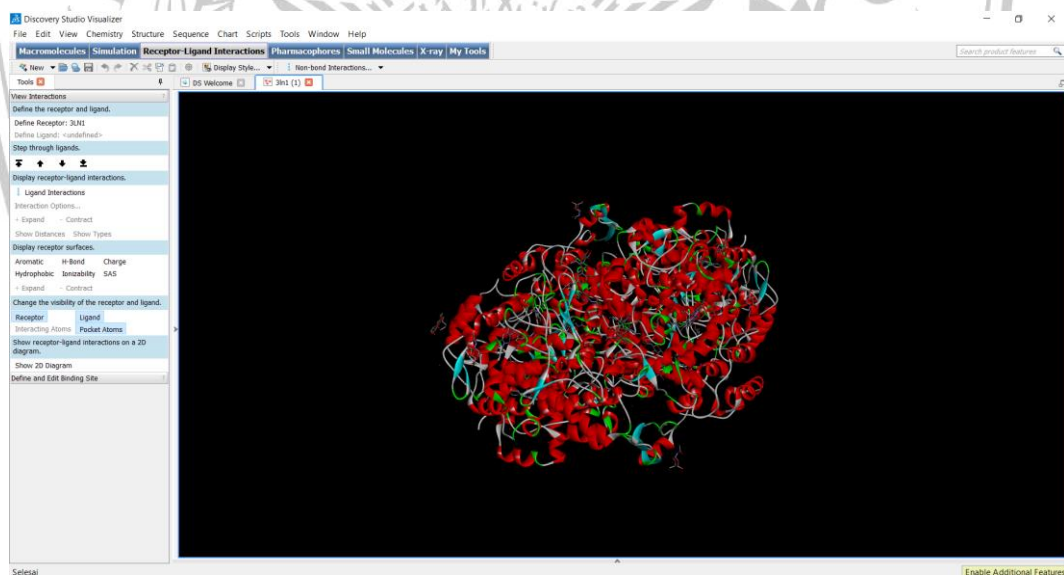
3. Klik *Save As* untuk menyimpan ligan dengan penamaan “LIGAN” dan format *.pdb.



Gambar 4. 17 Langkah ketiga pada tahap pemilihan ligan

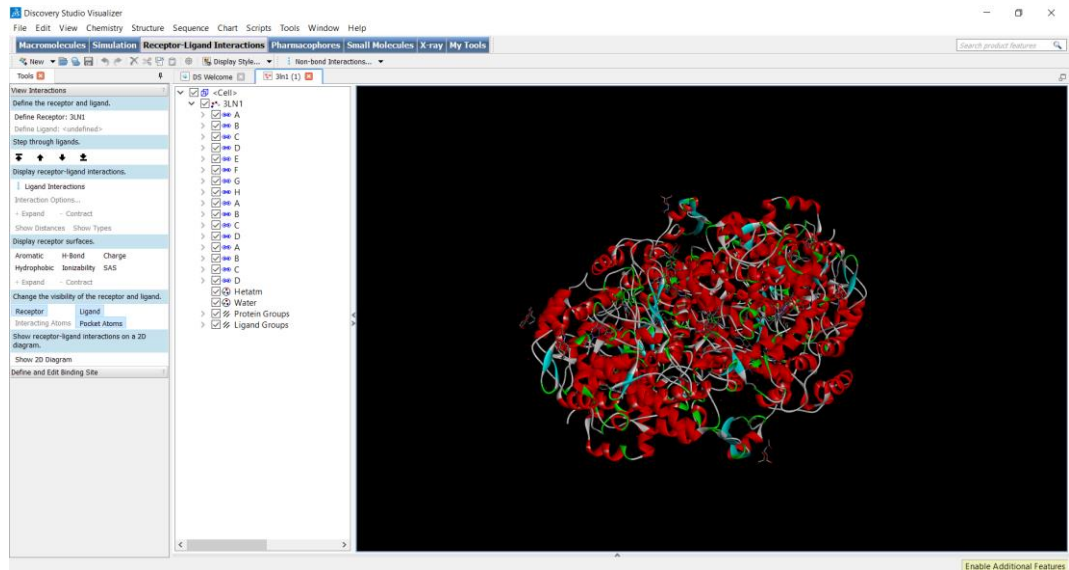
b. Pemilihan Protein Target

1. Aplikasi *Discovery Studio* dibuka, masukkan file PDB yang telah diunduh kemudian muncul gambar 3D.



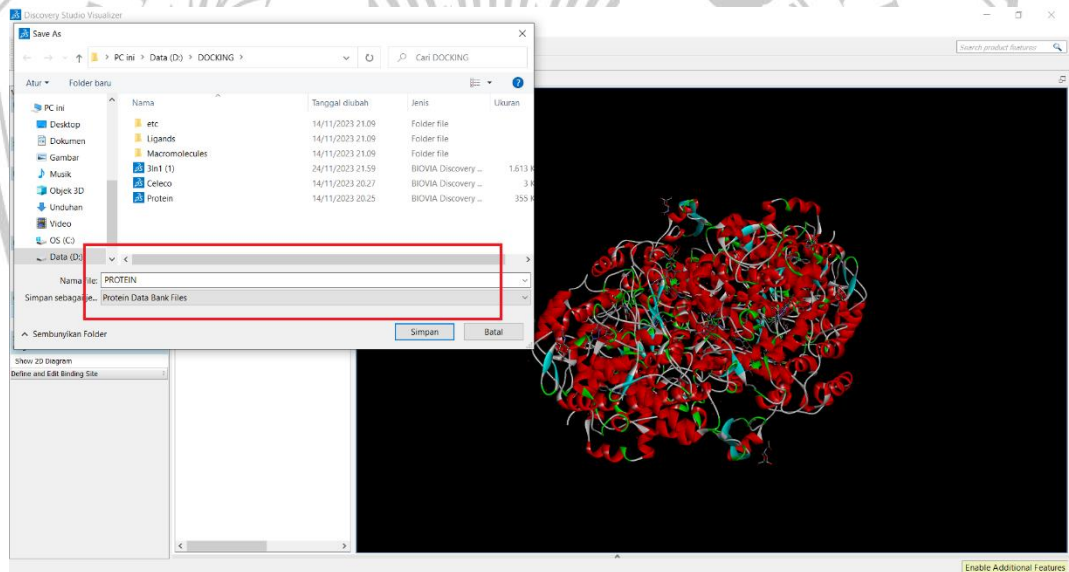
Gambar 4. 18 Langkah pertama pada tahap pemilihan target

2. Pada bagian atas klik menu view, pilih *Hierarchy* kemudian pilih unsur makromolekul yang terdapat pada layar.



Gambar 4. 19 Langkah kedua pada tahap pemilihan target

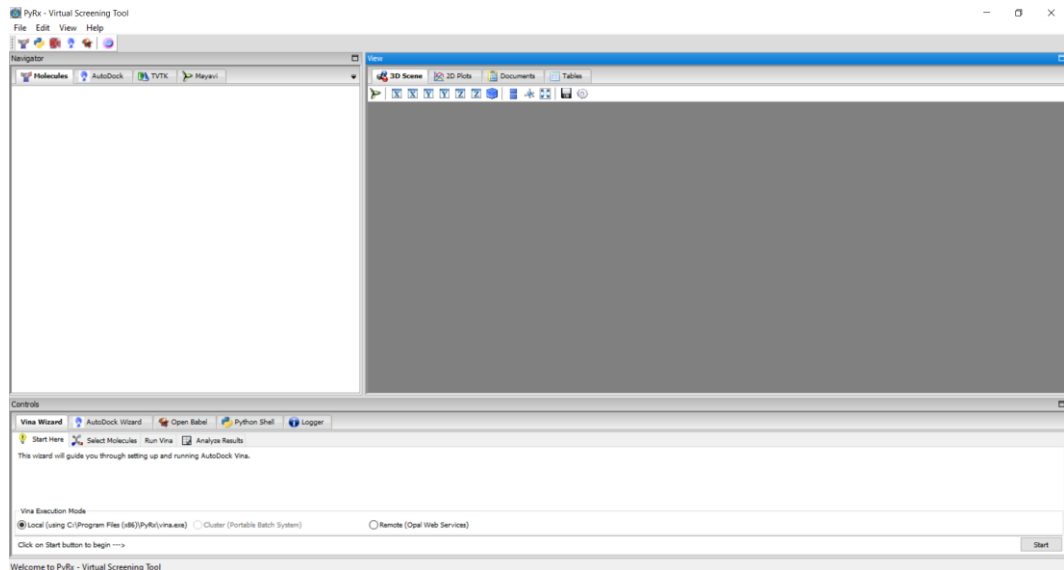
3. Klik Save as untuk menyimpan ligan dengan format *.pdb, beri nama "PROTEIN".



Gambar 4. 20 Langkah ketiga pada tahap pemilihan target

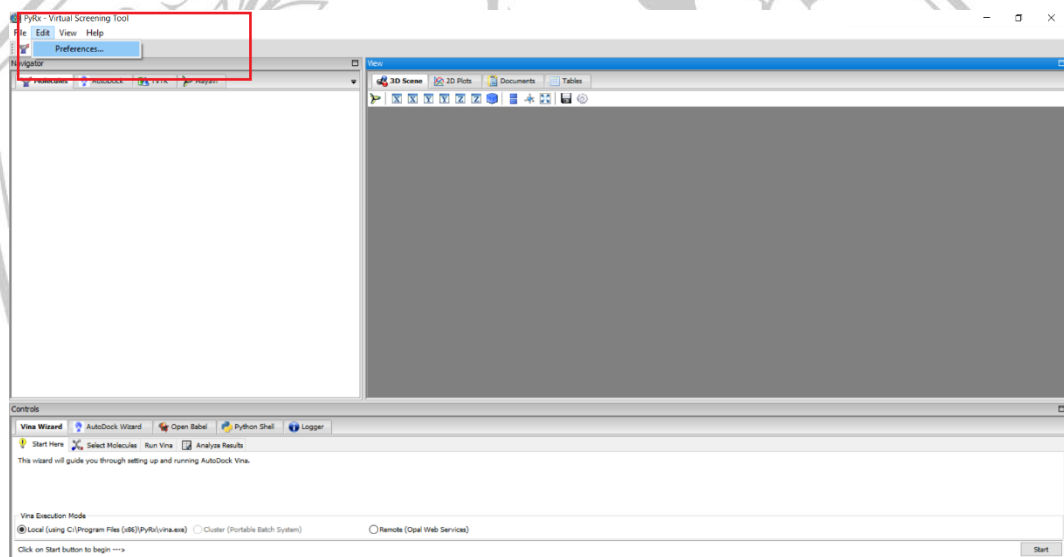
4.7.2.2 Preparasi Protein Target dan Ligan

1. Membuka aplikasi *Autodock Pyrx*.



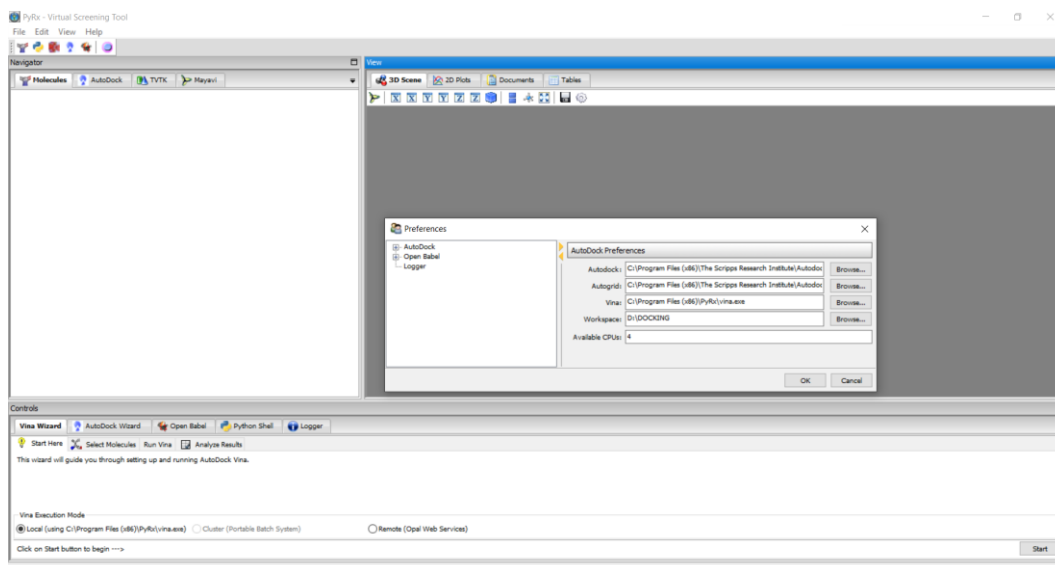
Gambar 4. 21 Langkah pertama pada tahap preparasi ligan dan target

2. Klik Edit kemudian pilih *Preferences*.



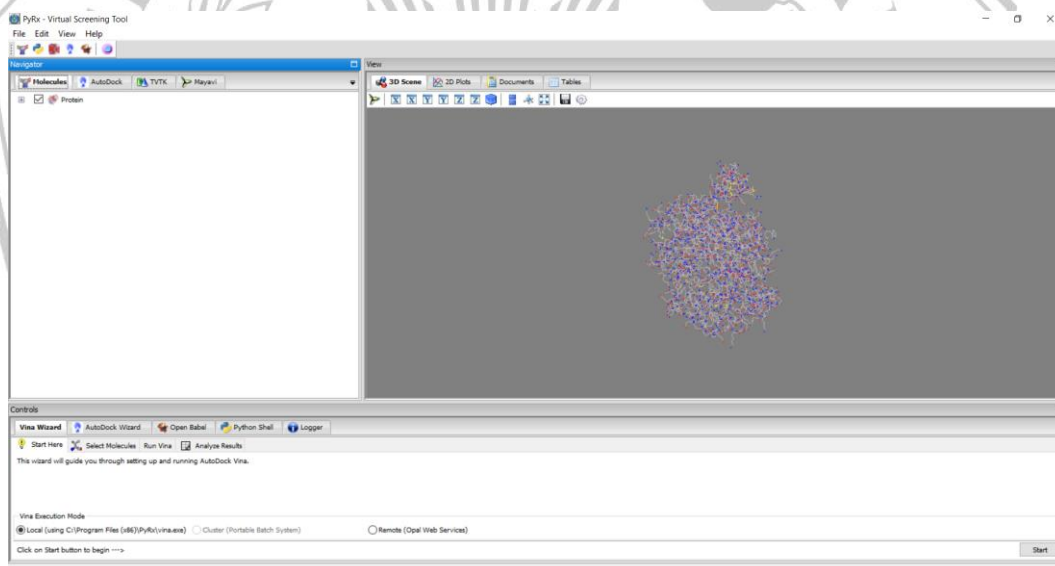
Gambar 4. 22 Langkah kedua pada tahap preparasi ligan dan target

3. Tekan tombol Browse pada kotak yang tersedia di *Preferences*, ubah bagian “Workspace”. Pilih file tempat untuk menyimpan hasil *molecular docking*.



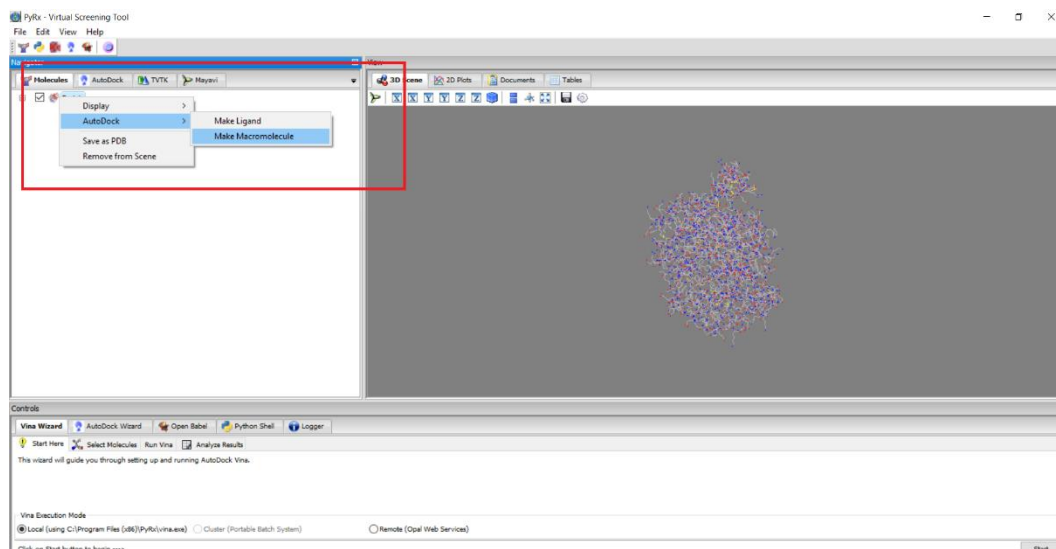
Gambar 4. 23 Langkah ketiga pada tahap preparasi ligan dan target

4. Klik kanan pada *worksheet Molecular*, kemudian pilih “*Load Molecule*”, tekan file “*PROTEIN*” yang sebelumnya disimpan.



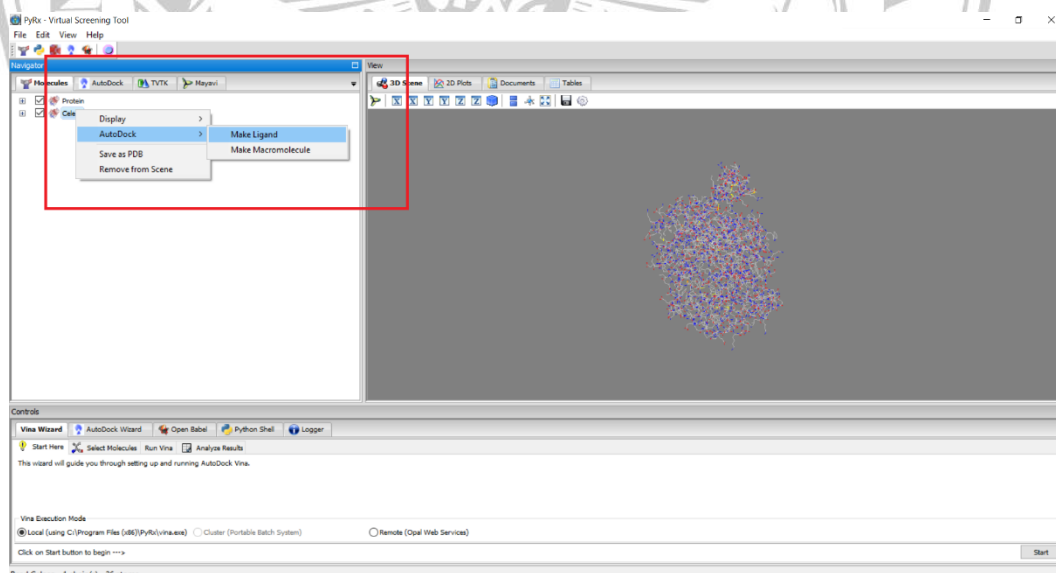
Gambar 4. 24 Langkah keempat pada tahap preparasi ligan dan protein

5. Pada *worksheet* muncul protein kemudian klik kanan, pilih *Autodock* dan tekan “*Make Macromolecules*”.



Gambar 4. 25 Langkah kelima pada tahap preparasi ligan dan protein

6. Makromolekul tersimpan secara langsung dengan format *.pdbqt. Hal ini menunjukkan bahwa protein target selesai dipreparasi.
7. Kemudian klik kanan pada *Molecules* kemudian pilih “*Load Molecule*”.
8. Selanjutnya klik file “*LIGAN*” yang telah disimpan sebelumnya. Klik kanan pada ligan yang telah muncul pada *worksheet*, pilih *Autodock* kemudian tekan “*Make Ligan*”.



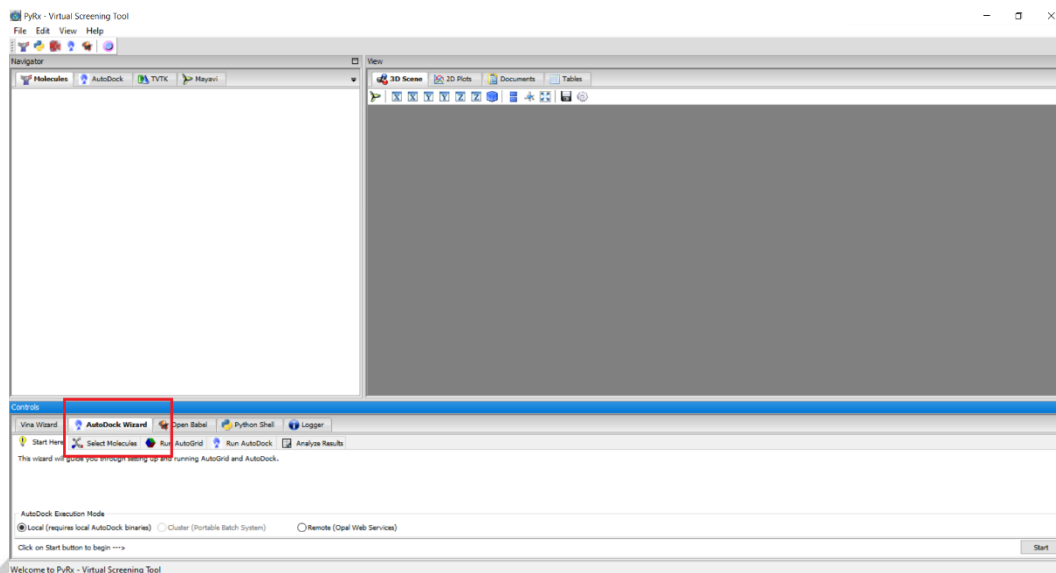
Gambar 4. 26 Langkah kedelapan pada tahap preparasi ligan dan protein

9. Ligan tersimpan secara langsung dengan format *.pdbqt. Hal ini menunjukkan bahwa ligan selesai dipreparasi.

4.7.2.3 Validasi Metode *Docking*

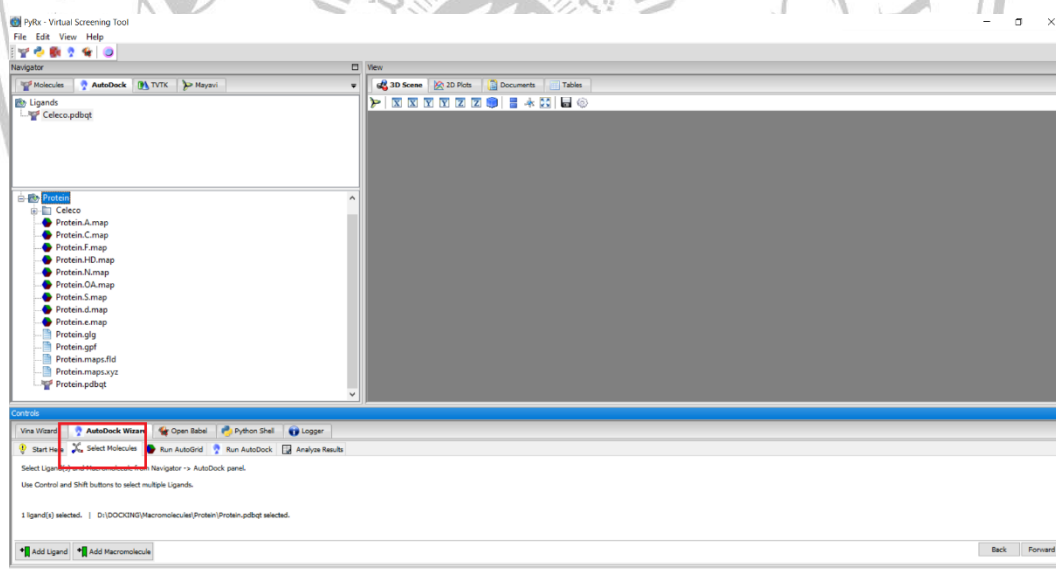
Tahap-tahap validasi metode *Docking*:

1. Membuka aplikasi *PyRx* atau *Autodock* , pilih *Autodock Wizard*.



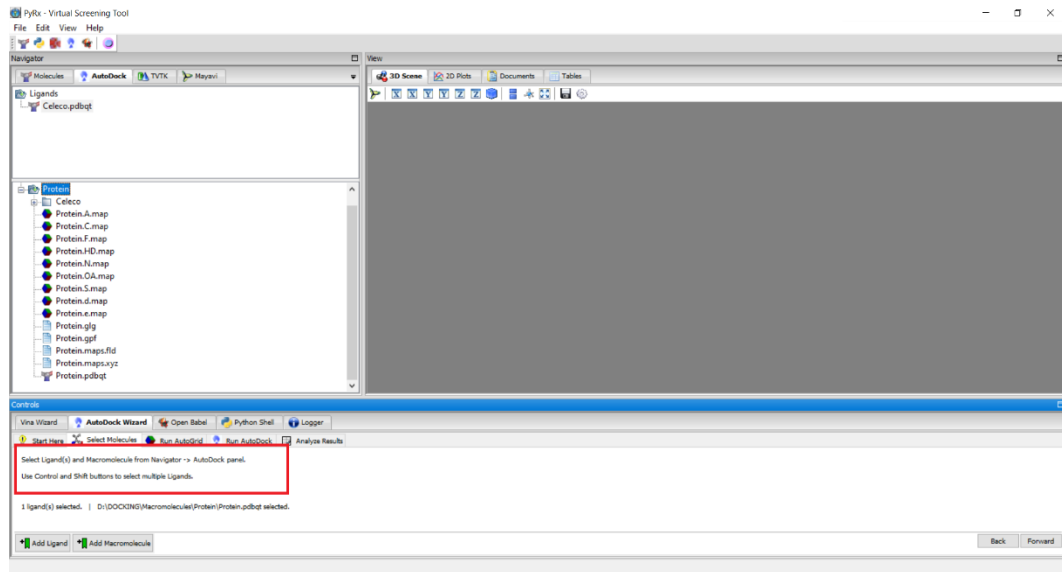
Gambar 4. 27 Langkah pertama validasi metode *docking*

2. Pilih “*select molecular*”, klik “Ligan dan protein” dengan format *.pdbqt.



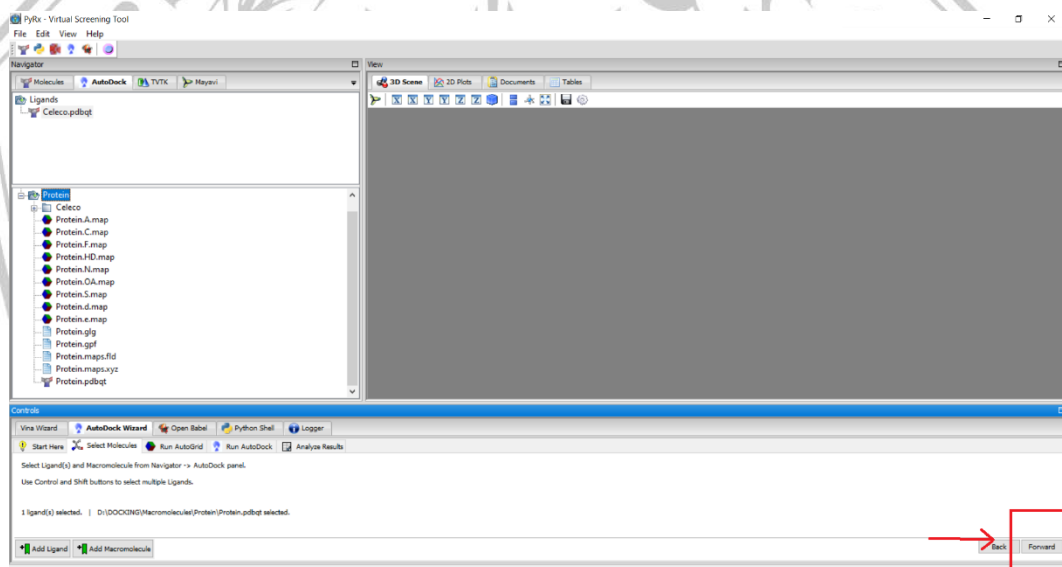
Gambar 4. 28 Langkah kedua validasi metode *docking*

3. Memastikan bahwa dalam Autodock panel terdapat “ligan” dan “protein” (*Ligan selected* dan *Macromolecul Selected*).



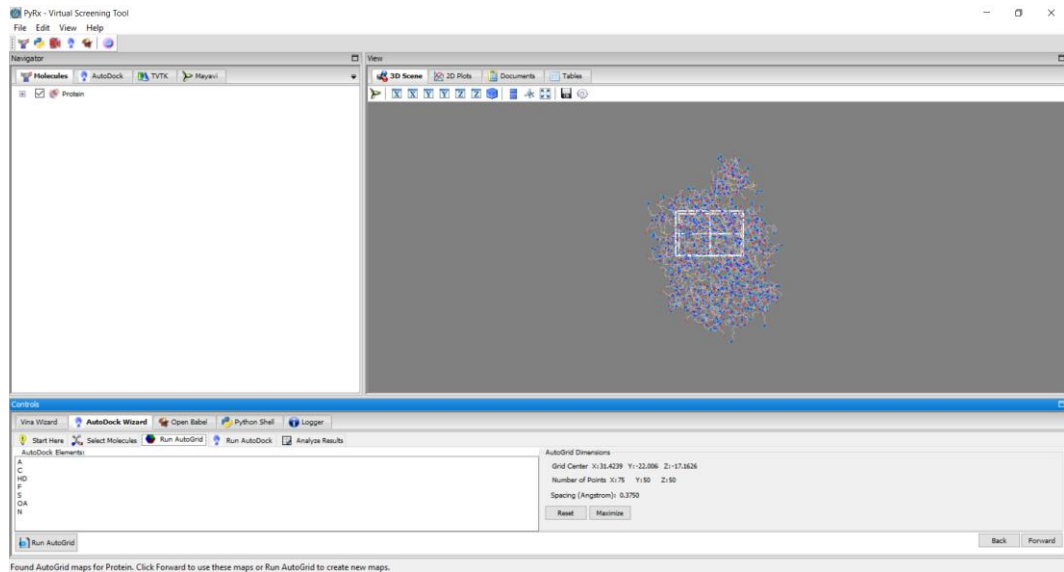
Gambar 4. 29 Langkah ketiga validasi metode docking

4. Klik “forward” yang terletak dibagian ujung bawah sebelah kanan.



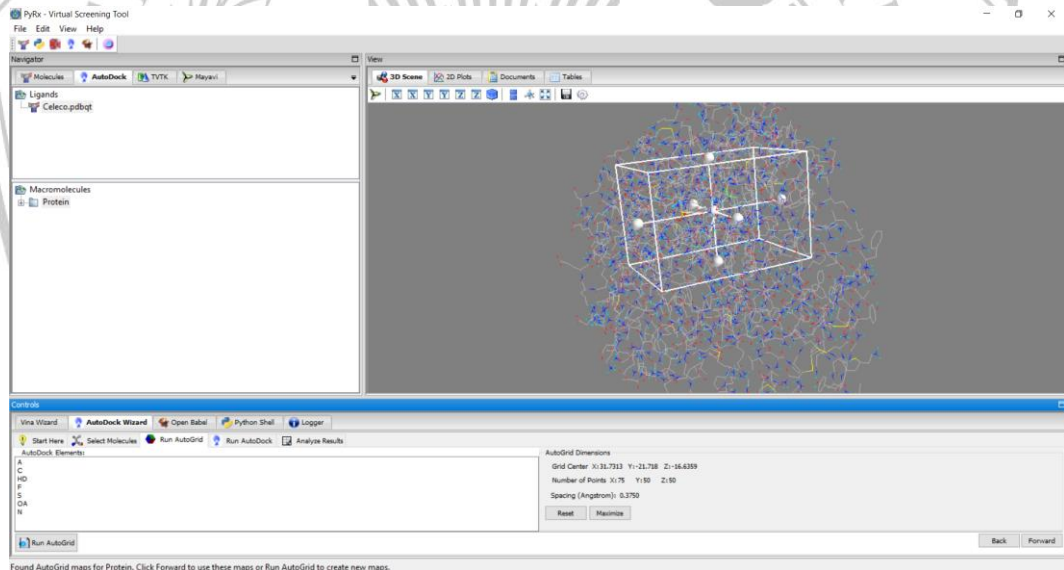
Gambar 4. 30 Langkah keempat tahap validasi metode *docking*

5. Selanjutnya akan muncul *Grid Box* pada tampilan kotak hasil 3D scene.



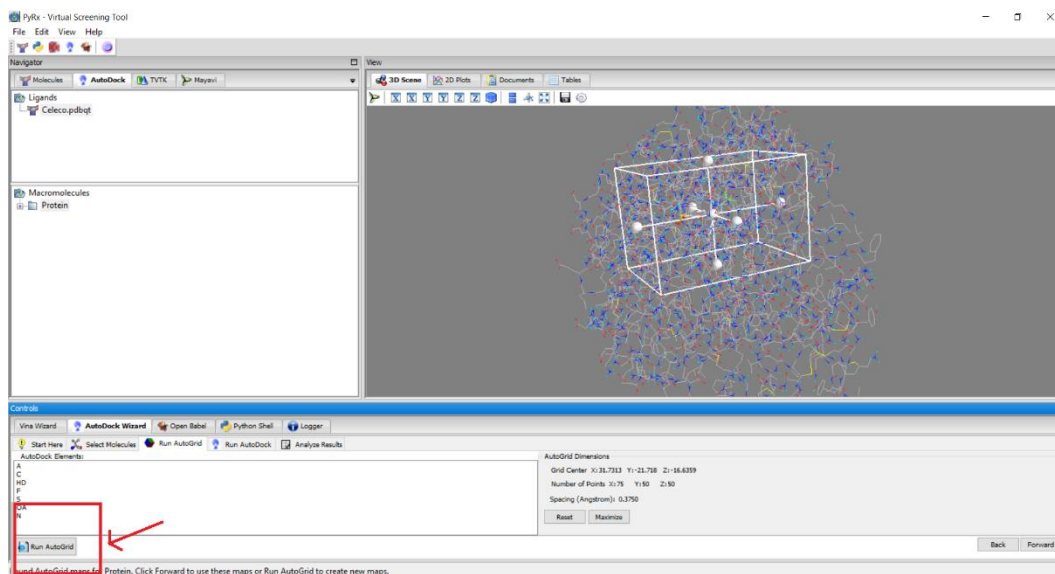
Gambar 4. 31 Langkah kelima validasi metode docking

6. Kemudian meletakkan *Grid box* ditengah ligan dan setarakan besarnya angka pada “*Number of point in xyz-dimension*”.



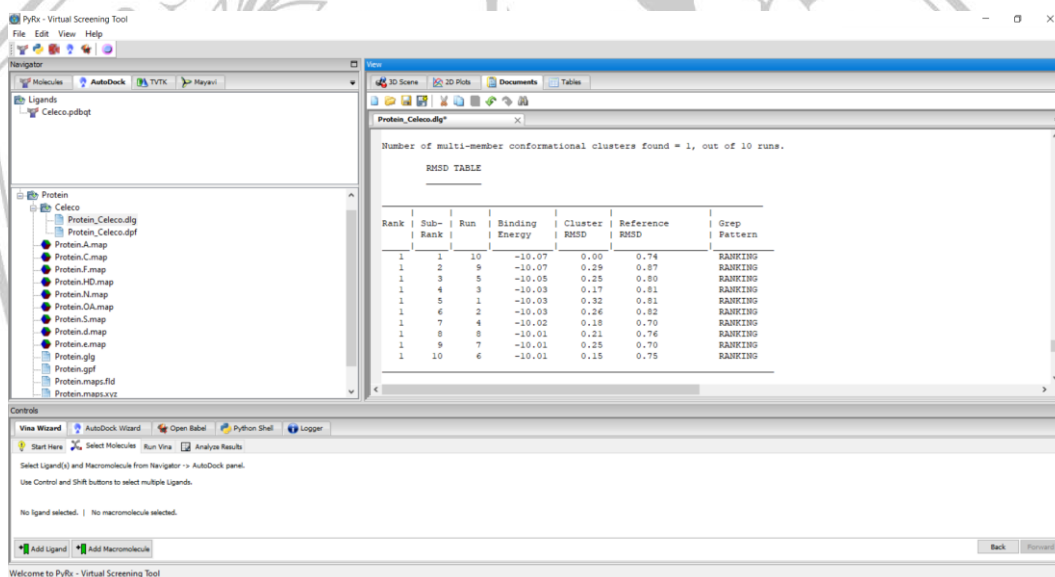
Gambar 4. 32 Langkah keenam tahap validasi metode docking

7. Klik *Run Autogrid*, kemudian terjadi proses *molecular docking* dan tunggu sampai selesai.



Gambar 4. 33 Langkah ketujuh validasi metode docking

8. Kemudian klik *Run Autodock* dan tunggu hasil *molecular docking* selesai.



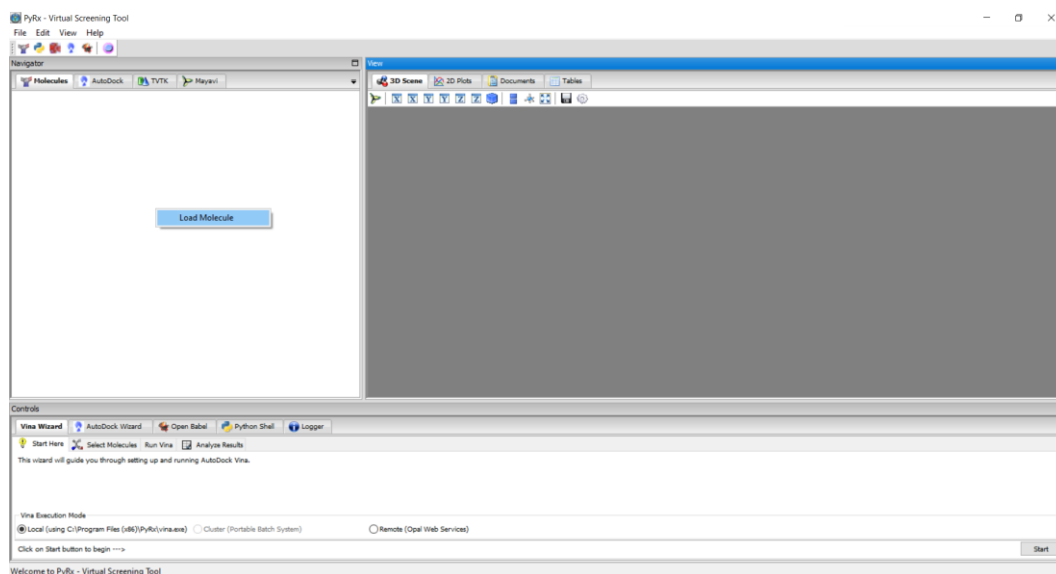
Gambar 4. 34 Langkah kedelapan validasi metode docking

9. Untuk melihat nilai RMSD, klik "*structure*" kemudian pilih *RMSD All atoms*. Persyaratan nilai RMSD yaitu deviasi hubungan bentuk ligan-reseptor pada proses *molecular docking* kurang dari 2Å, yang artinya validasi proses *molecular docking* dianggap valid.

4.7.2.4 *Molecular docking* senyawa uji

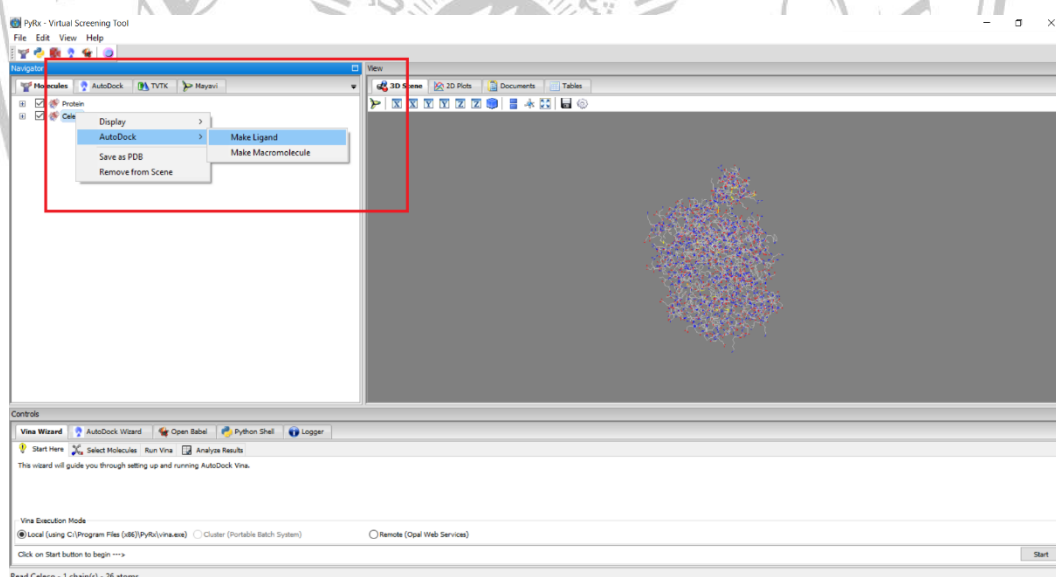
Tahap berikutnya yaitu proses *molecular docking* pada senyawa turunan asam 5-bromo-O-benzoil salisilat (2) dan protein target sebagai referensi. Berikut langkah-langkah *molecular docking* :

1. Klik kanan pada lembar *molecules*, pilih “Load molecule” kemudian dipilih hasil preparasi senyawa uji yang menggunakan *Avogadro*.



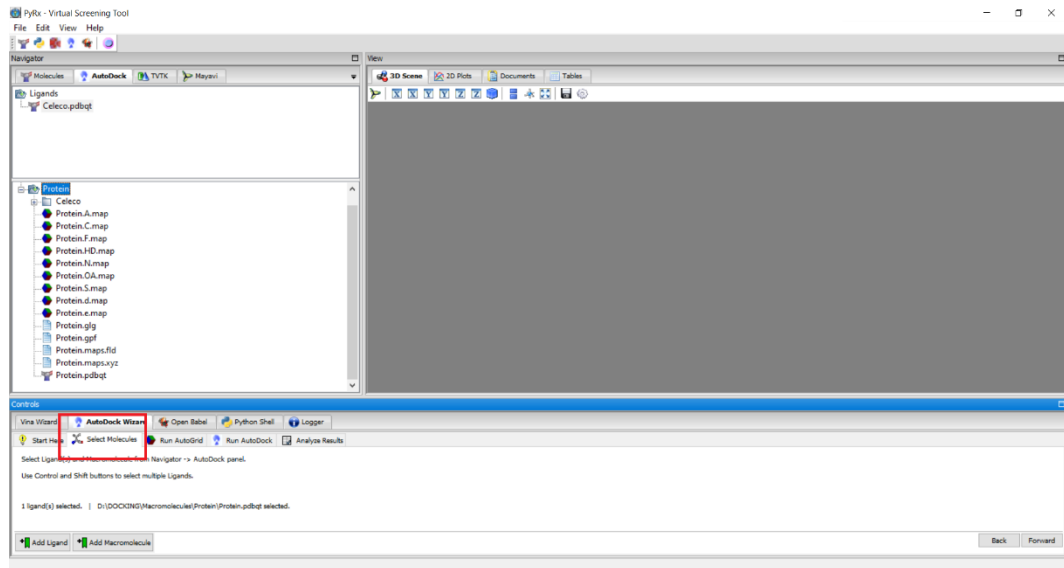
Gambar 4. 35 Langkah pertama *molecular docking* senyawa uji

2. Klik kanan pada tiap senyawa uji kemudian pilih *Autodock* lalu klik “make ligand”.



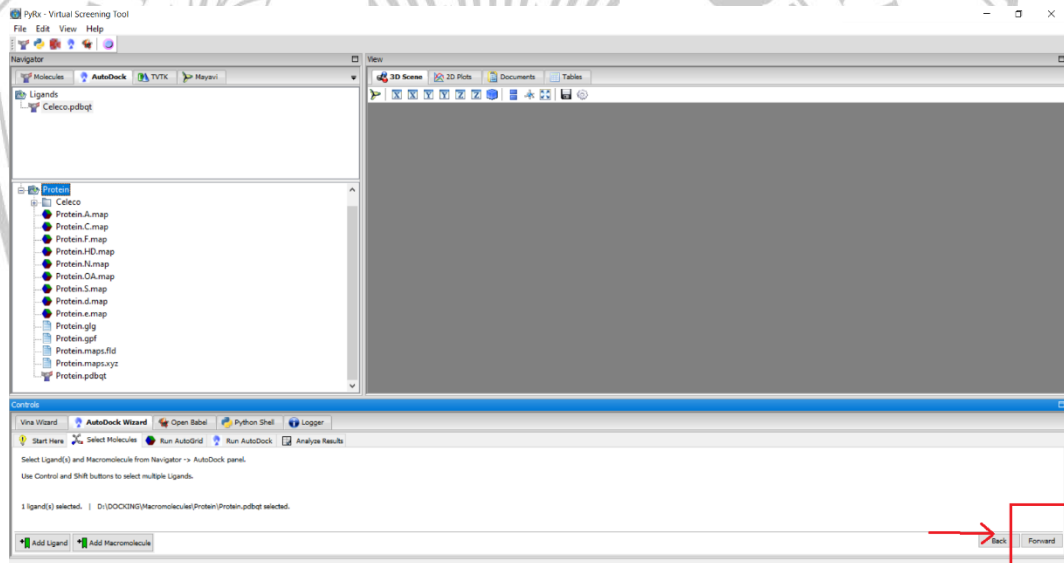
Gambar 4. 36 Langkah kedua *molecular docking* senyawa uji

3. Secara langsung senyawa akan disimpan dengan format *.pdbqt. dan preparasi senyawa uji selesai dipreparasi.
4. Klik “select molecules” pada lembar kerja *Autodock Wizard* kemudian pilih senyawa uji dan protein target yang akan dilakukan *docking*.



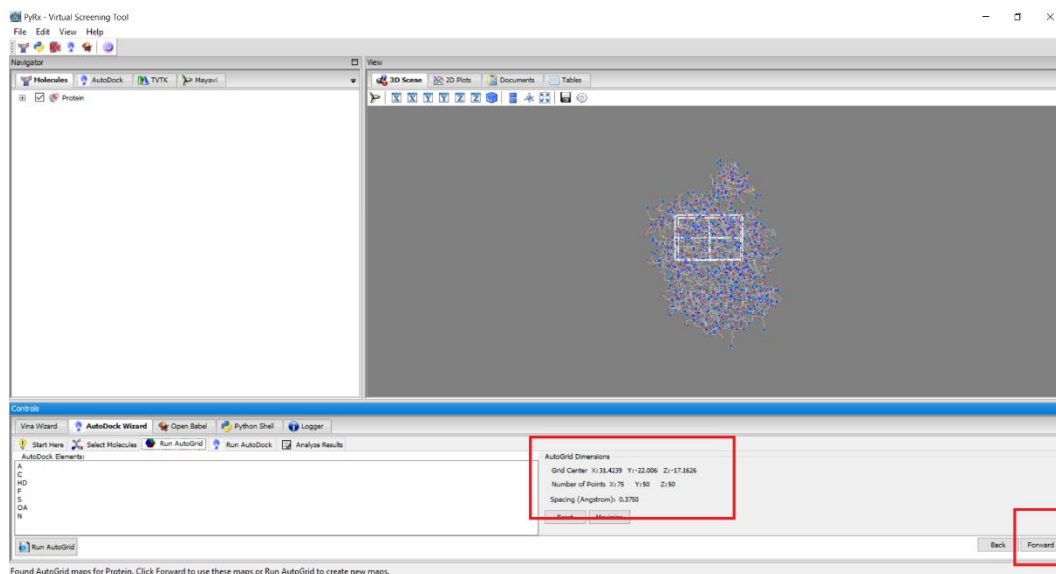
Gambar 4. 37 Langkah keempat *molecular docking* senyawa uji

5. Selanjutnya pilih “Forward” yang terletak dibagian ujung bawah sebelah kanan.



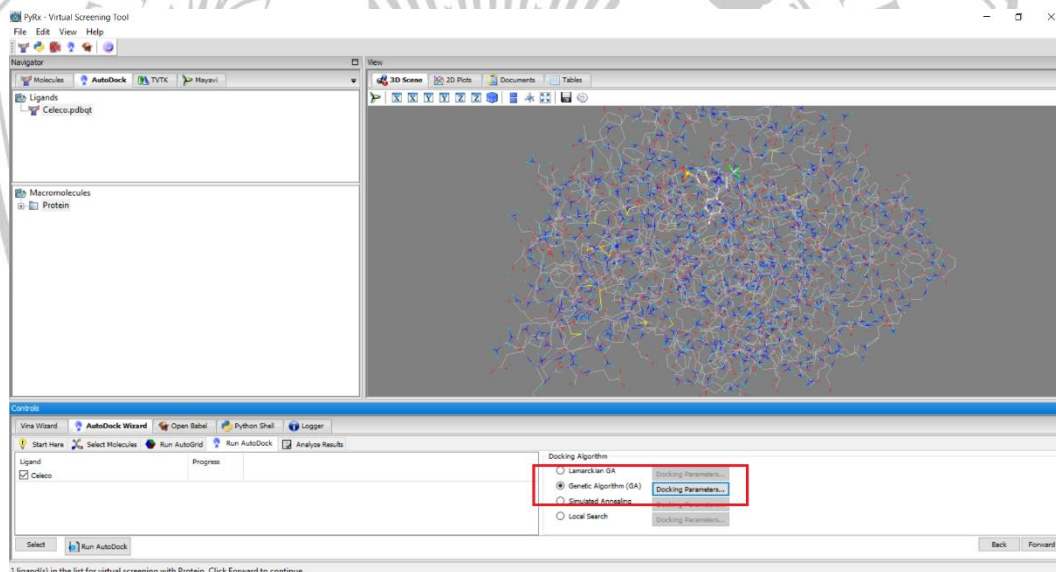
Gambar 4. 38 Langkah kelima *molecular docking* senyawa uji

6. Pada saat validasi *molecular docking autoGrid* telah terpasang. Selanjutnya pilih “Forward” pada bagian ujung bawah sebelah kanan.



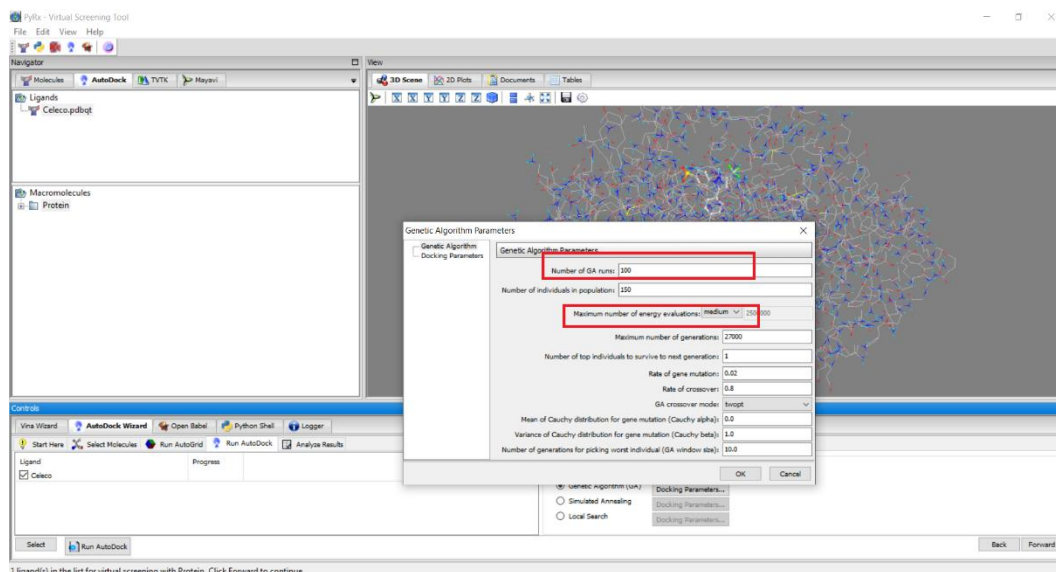
Gambar 4. 39 Langkah keenam *molecular docking* senyawa uji

7. Langkah selanjutnya yaitu mengatur parameter docking dengan menekan “*Genetic Alogorithme*” kemudian pilih “*Molecular docking parameter*”.



Gambar 4. 40 Langkah ketujuh *molecular docking* senyawa uji

8. Selanjutnya *number of GA runs* diatur pada angka 100 dan bagian *Maksimum number of energi evalutations* diatur pada skala medium. Kemudian pilih “*lamarkian GA*”, tekan “*Run Autodock*” yang terletak di ujung bawah sebelah kiri. Proses *molecular docking* akan berjalan dan tunggu hingga selesai.



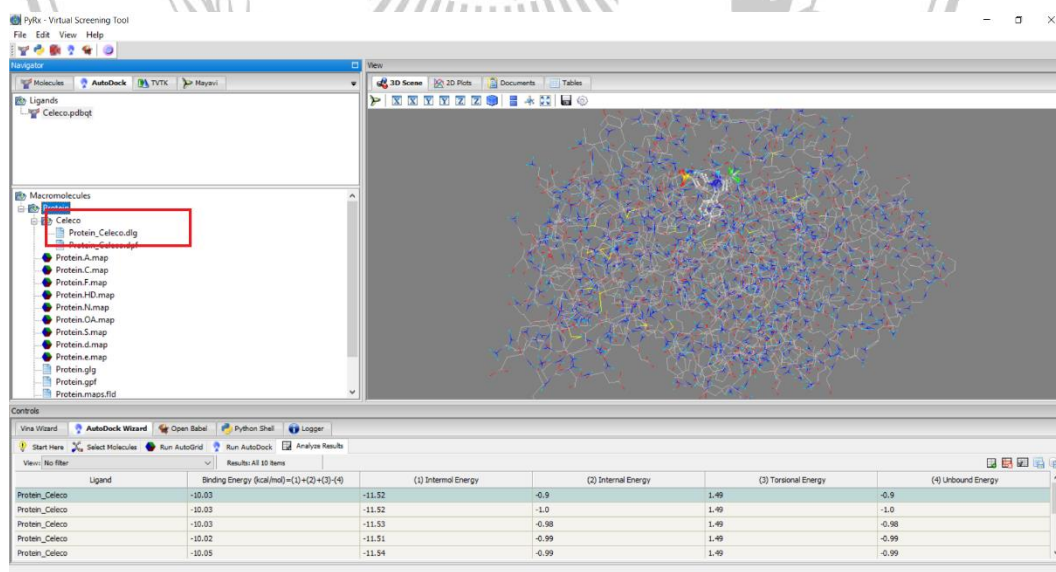
Gambar 4. 41 Langkah kedelapan *molecular docking* senyawa uji

9. Setelah itu didapatkan hasil *molecular docking* dengan format file *.dlg, pada file ini didapat data berupa nilai RMSD beserta perhitungan secara statistika.

4.7.2.5 Analisis Hasil Docking

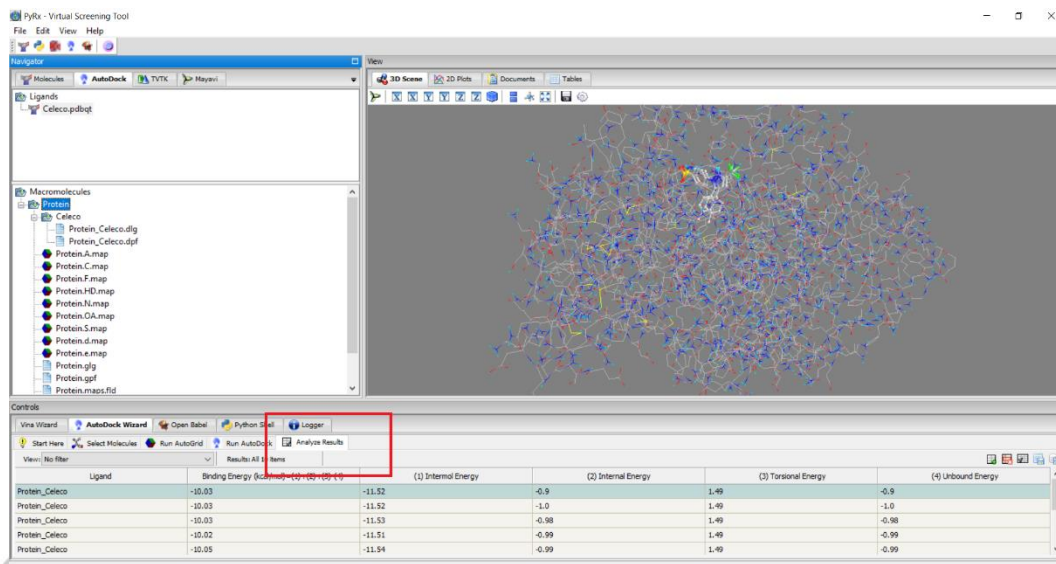
Langkah selanjutnya digunakan *Autodock PyRx* seri 0.8 untuk mengkaji hasil *docking* turunan asam 5-bromo-O-benzoil salisilat (2) dan senyawa referensi. Tahap-tahap analisis hasil *docking* sebagai berikut:

1. Pilih file hasil dari proses *molecular docking* dengan format *.dlg. pada lembar Autodock.



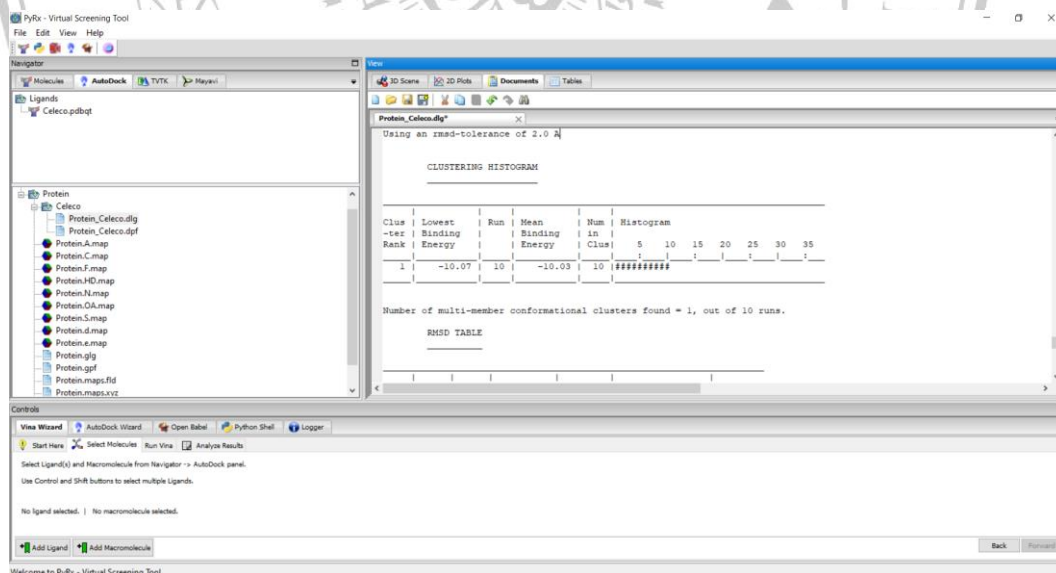
Gambar 4. 42 Langkah pertama analisis hasil *docking*

- Pilih “Autodock Wizard” kemudian pilih “Analyze result”, klik “Insert new items” lalu buka pada folder penyimpanan hasil *molecular docking*, pilih file hasil *docking* senyawa uji yang telah disimpan dengan format *.dlg.



Gambar 4. 43 Langkah kedua analisis hasil *docking*

- Selanjutnya dilakukan analisis data *clustering* melalui data yang telah diperoleh dari file *docking* parameter dengan format penyimpanan *.dlg. kemudian pilih file dan hasil akan tertera pada lembar kerja *Autodock*.



Gambar 4. 44 Langkah ketiga analisis hasil *docking*

- Data yang digunakan yaitu data dengan total *cluster* yang paling tinggi dan memiliki energi yang paling kecil. Jika terdapat data dengan total *cluster* paling tinggi dan mempunyai energi lebih besar dibandingkan total *cluster*

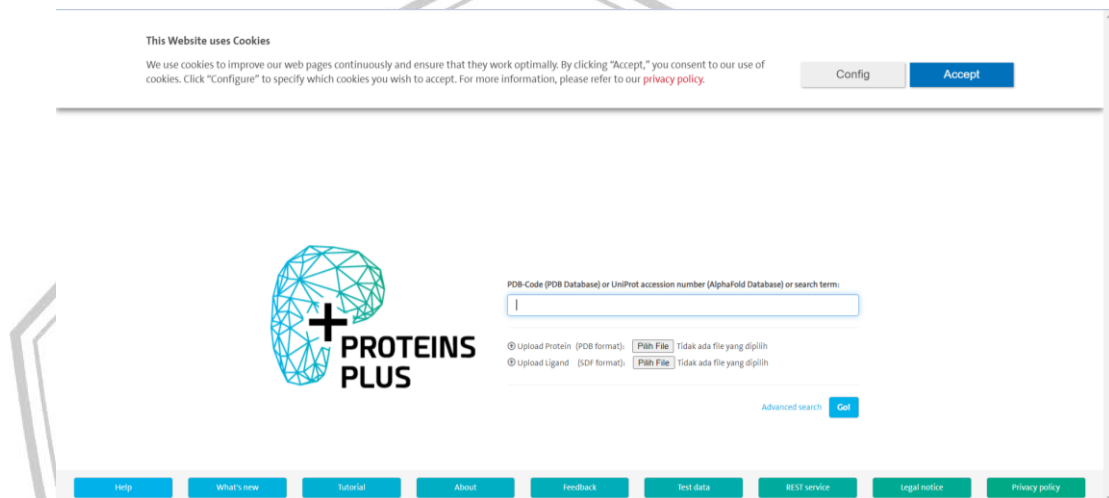
yang lebih kecil, maka data yang diambil yaitu data dengan *cluster* yang paling tinggi.

5. Selanjutnya data disimpan dengan format *.sdf.

4.7.2.6 Visualisasi Hasil *Docking*

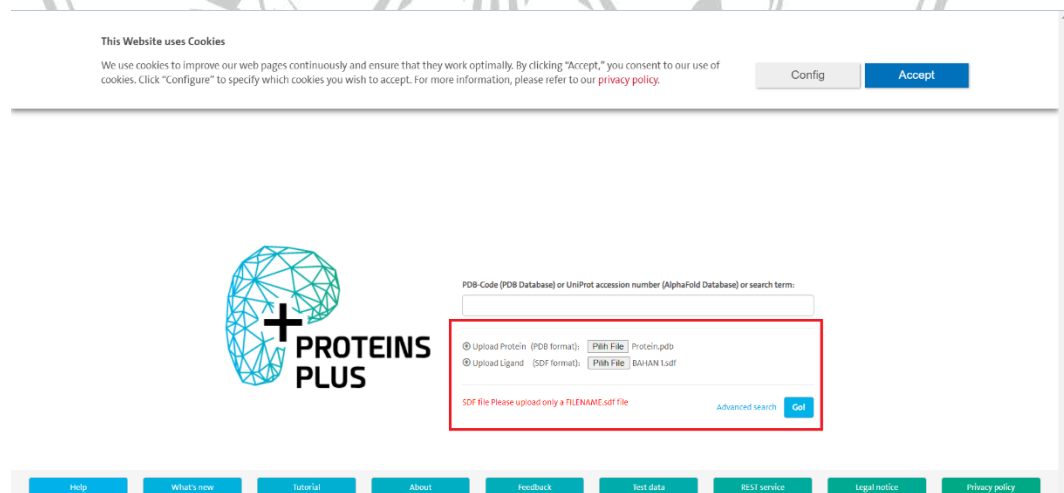
Tujuan dari proses visualisasi hasil *docking* yaitu untuk mengamati interaksi antara ligan uji dengan protein target yang diamati dalam format 2D dan 3D. Tahap-tahap visualisasi hasil *docking* sebagai berikut:

1. Membuka *webserver protein-plus*.



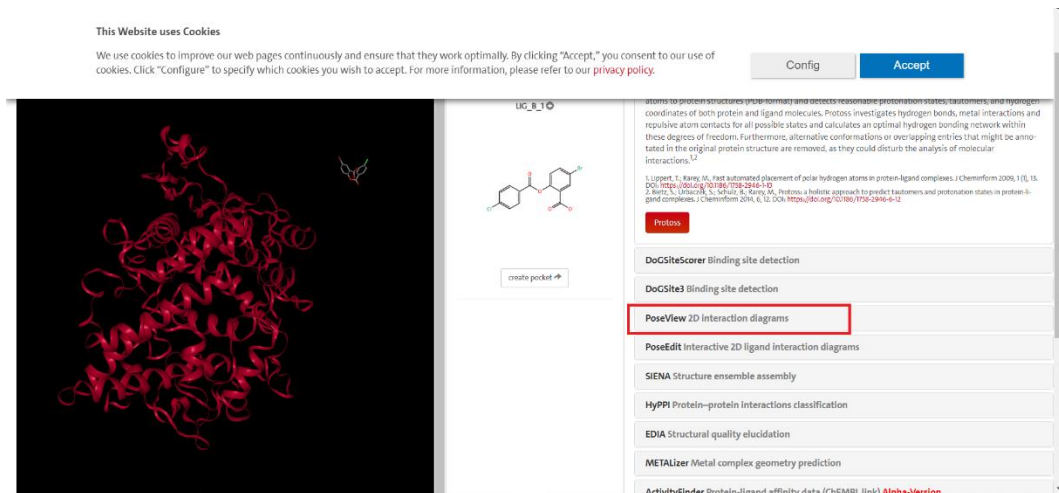
Gambar 4. 45 Langkah pertama visualisasi hasil *docking*

2. Selanjutnya masukkan protein target yang disimpan dalam format .pdb, serta file senyawa uji yang terpilih dalam format *.sdf.



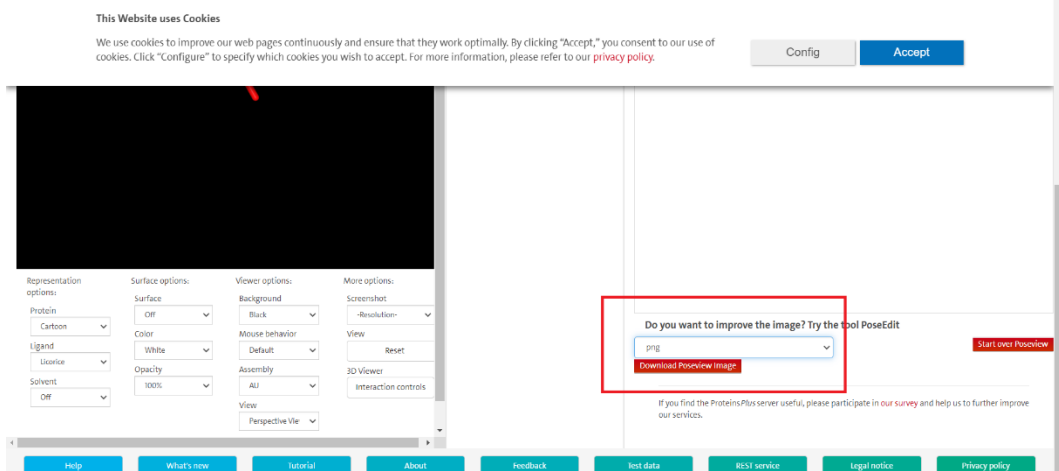
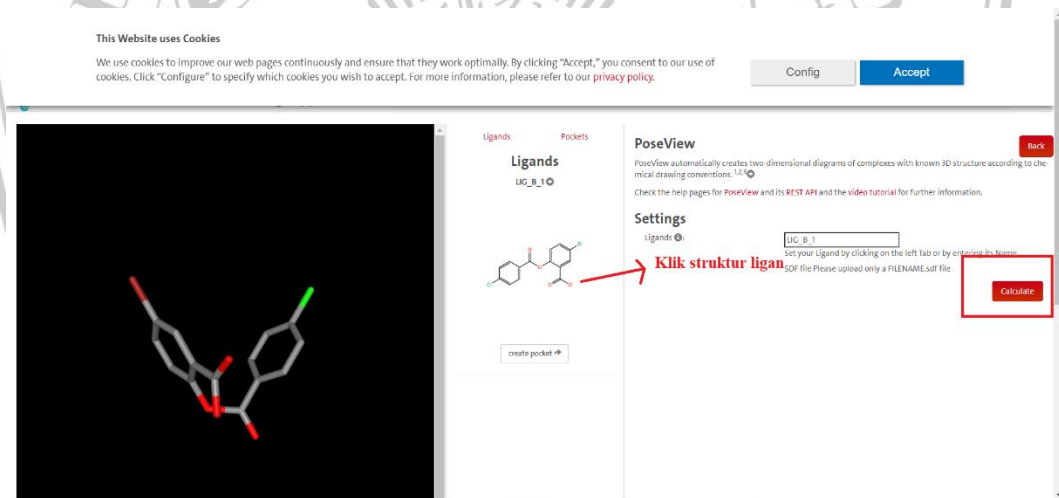
Gambar 4. 46 Langkah kedua visualisasi hasil *docking*

3. Tekan “Go”, klik “*Pose view 2D Interaction Diagram*” kemudian klik “*Pose view*”.



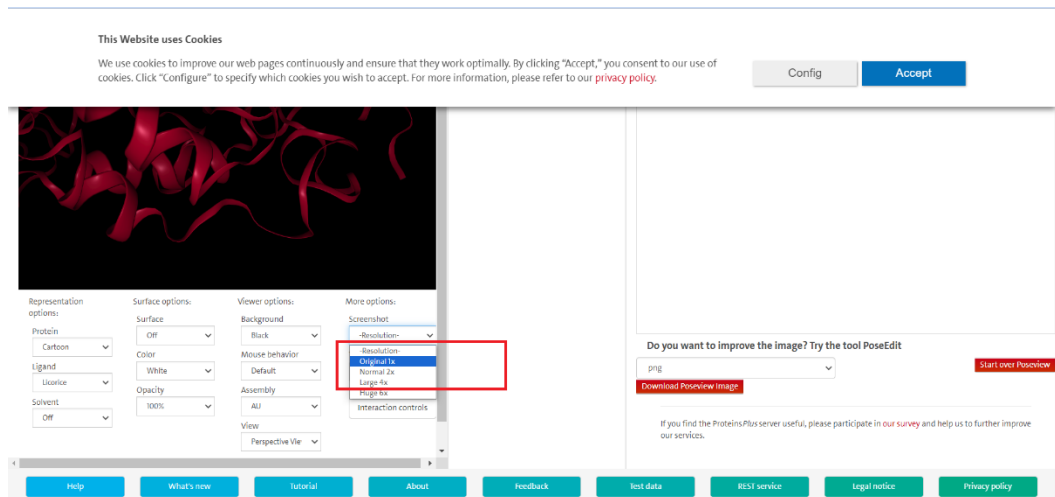
Gambar 4. 47 Langkah ketiga visualisasi hasil *docking*

4. Selanjutnya klik “*structure ligan*”, pilih “*calculate*” kemudian tunggu sampai muncul struktur 2D dari ligan terpilih. Hasil disimpan dalam format *.png.



Gambar 4. 48 Langkah keempat visualisasi hasil *docking*

- Untuk mengamati visualisasi bentuk 3D-nya ,ligan diputar sampai bentuk terlihat secara jelas dan nyata. Kemudian tangkap layar dan klik “*original 1x*”.

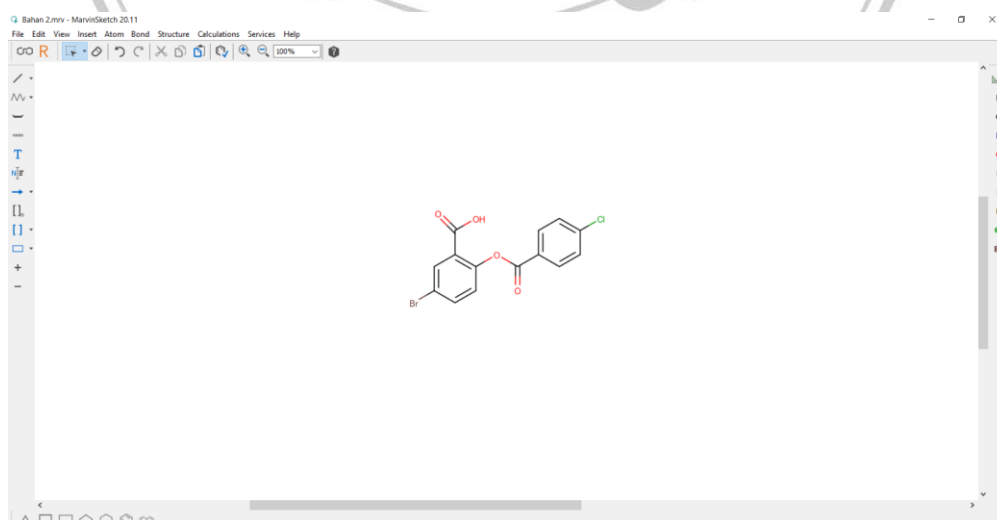


Gambar 4. 49 Langkah kelima visualisasi hasil *docking*

4.7.3 Prediksi Sifat Farmakokinetik dan Toksisitas (ADMET)

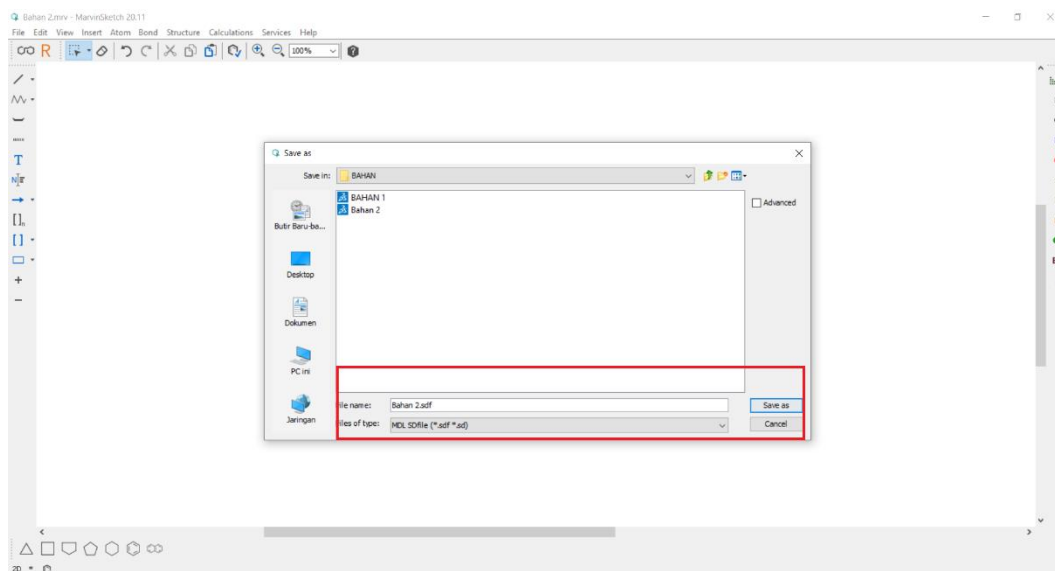
Langkah ini dilakukan dengan alat online pkCSM untuk memprediksi sifat fisikokimia diantaranya berat molekul (BM), logaritmik oktanol/koeffisien partisi (Log P), akseptor ikatan hidrogen (HBA) dan donor ikatan hidrogen (HBD). Selain itu dilakukan prediksi sifat farmakokinetik yaitu absorpsi, distribusi, metabolisme dan ekskresi (ADME) dan prediksi toksisitas pada senyawa turunan asam 5-bromo-O-benzoil salisilat (2). Berikut langkah-langkahnya:

- Membuka program *Marvin Sketch* 20.11, menggambar struktur kimia 2D dari senyawa turunan asam 5-bromo-O-benzoil salisilat (2) dan senyawa induk.



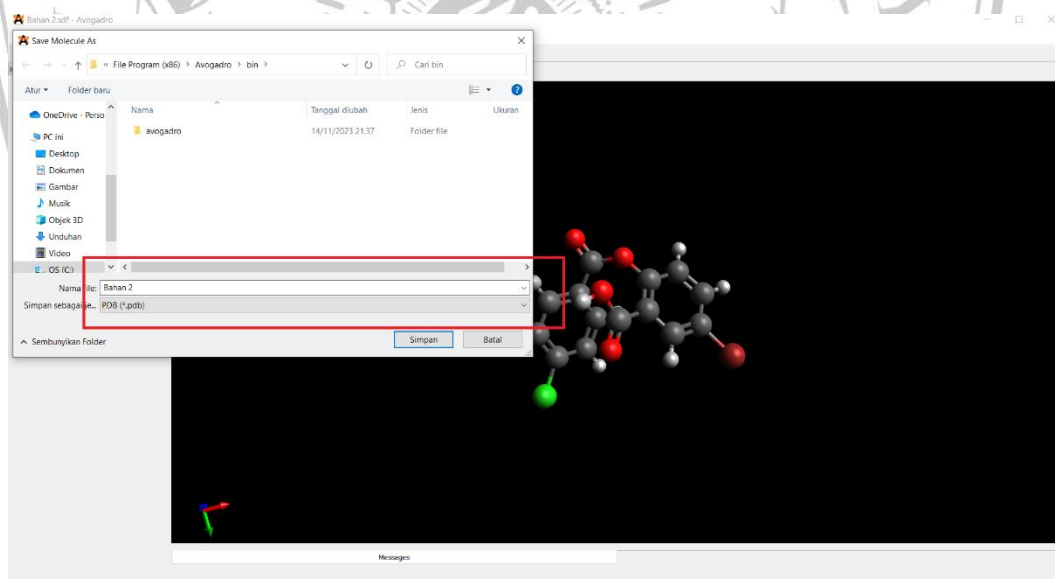
Gambar 4. 50 Langkah pertama tahap prediksi ADMET

2. Simpan tiap struktur yang sudah digambar dengan format *.sdf.



Gambar 4. 51 Langkah kedua tahap prediksi ADMET

3. File yang sudah disimpan kemudian dimasukkan ke *software* Avogadro untuk membuat struktur 3D kemudian disimpan dengan format *.pdb.



Gambar 4. 52 Langkah ketiga tahap prediksi ADMET

4. Data yang tersimpan dalam bentuk SD file diubah ke bentuk SMILES menggunakan SMILES Translator (<https://cactus.nci.nih.gov/translate>). Setelah itu pkCSM dijalankan.

NCI/CADD Group

Online SMILES Translator and Structure File Generator

Form | News | Help | Acknowledgments

Input Format

[Start Structure Editor](#)

Please choose this field if you want to submit your own SMILES strings or create a SMILES string using the Structure Editor. A submitted file has precedence, so delete any entry below if you want to submit a new SMILES string.

(Batch: 2-3d pdb)

Please choose this field if you want to translate from a file. The service will automatically recognize SD files (single and multiple structure), text files with multiple SMILES fields, MOL files and PDB files (and in fact any other format CACTVS recognizes).

Unique SMILES Output Format
(Unique SMILES)

☒ Display on screen
☐ SMILES TXT file
☐ SDP
☐ PDB
☐ MOL (only single structure generated)

Use

☒ Kekule or
☐ Aromatic
 SMILES representation (choose "Aromatic" for closer approximation to Daylight USMILES)

SD, PDB or MOL files should contain
☒ 2D
☐ 3D coordinates

If the input file contains a single structure, the output will also be single structure. Multiple structure input formats will generate multiple structure output for those formats that support this. Otherwise, only the first structure will be used. SD files will contain a UNIQUE_SMILES field for unique SMILES and an USER_SUPPLIED_SMILES field for the user-supplied SMILES (if available)

Read about our new web services at [/blog](#)

Bug reports, comments or questions?

Last Update: 2020-04-21

Center for Cancer

NATIONAL CANCER INSTITUTE

National Cancer Institute

National Institutes of Health

Department of Health and Human Services

USA.gov

Unique SMILES: OC(=O)C1=C(C(OC(=O)C2=CC=C(C)C=C2)C=CC(=C)Br

User-supplied SMILES: ---

(Unique SMILES - Daylight 1989 definition)

Gambar 4. 53 Langkah keempat tahap prediksi ADMET

- Membuka pkCSM *web server* setelah itu data bentuk SMILES diproses pada link (<https://biosig.unimelb.edu.au/pkcsml/prediction>). Tahap ini bertujuan memperkirakan profil ADME dan toksisitas senyawa.

pkCSM Theory Help Contact Acknowledgments Related Resources License (non-academic)

Run example

Disclaimer

No molecule information will be retained on the system after being uploaded by the user.

Step 1: Please provide a set of molecules (SMILES format)

Description

Upload your SMILES file:

Tidak ada file yang dipilih

Files are expected to have headers identifying the columns [\[Link\]](#)

OR

Provide a SMILES string:

Example:
CC(=O)OC1=CC=CC=C1C(=O)O

Step 2: Please choose the prediction mode

Description

Prediction of pharmacokinetic properties

Absorption
Distribution
Metabolism
Excretion
Toxicity
ADMET

Gambar 4. 54 Langkah kelima tahap prediksi ADMET