

BAB IV
UNDUH DAN INSTAL
SOFTWARE UNTUK MOLECULAR DOCKING PLANTS

Beberapa software yang tidak perlu diinstal (sudah tersedia di CD program), hanya dicopy paste adalah:

plants (PLANTS) adalah program aplikasi *molecular docking* gratis yang diketahui memiliki kualitas seperti GOLD (aplikasi molecular docking yang berbayar). Software ini banyak digunakan di Eropa dan Amerika. **Software plants dalam buku ini hasil inovasi sdr Satyo Nuryadi, S.T., M. Eng dosen UTY , Yogyakarta**

cmd adalah cmd hasil inovasi sdr Satyo Nuryadi, berbeda dengan cmd bawaan laptop dengan operasi windows

pc_4pyp.txt adalah modifikasi plantsconfig dari linux ke windows bit64 oleh sdr Satyo Nuryadi. ***4pyp adalah template yang digunakan untuk membuat plantsconfig untuk PDB yang sedang divalidasi***, misalnya untuk 6LU7.PDB maka bindingsite centre dan bindingsite radius pc_4pyp harus diganti dengan bindingsite centre dan bindingsite radius 6LU7. PDB yang akan muncul saat command line >plants --mode bind ref_ligand.mol2 5 protein.mol2

mingwm10.dll adalah software yang harus diletakkan di folder yang digunakan untuk running docking, yang juga terhadap file plants, cmd dan pc_4pyp.txt

4.1. Download dan instalasi ChemAxon

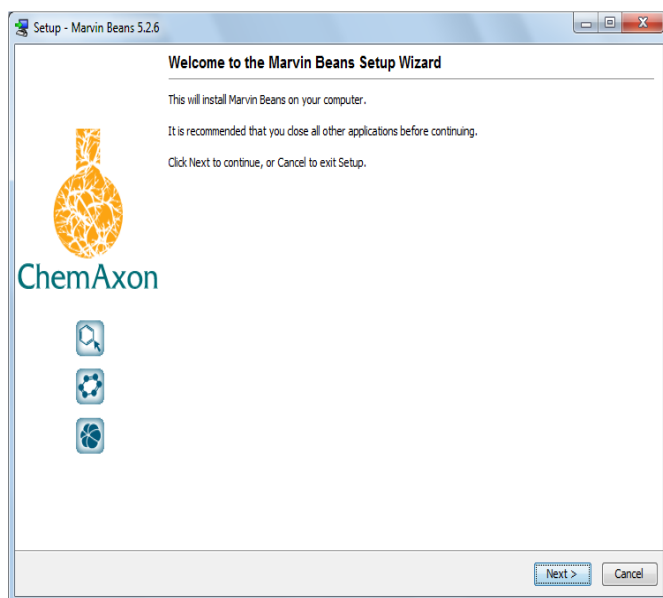
Langkah-langkah:

Dalam paket ini disertai software ChemAxon secara gratis. Namun jika ingin mendownload sendiri dapat diikuti langkah berikut

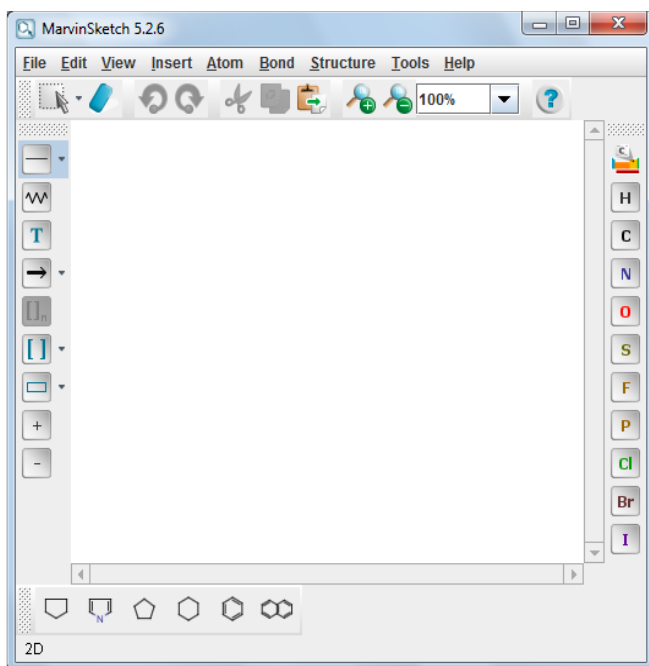
4.1.1. Buka link <http://www.chemaxon.com/marvin/download-user.html>

4.1.2. Klik “I accept the terms of the license agreement”, kemudian double click “Windows Installer with Java”. Anda akan diarahkan ke halaman login

- 4.1.3. Jika sudah memiliki akun, silakan langsung ke langkah keempat. Jika belum memiliki akun, klik “registration”. Setelah masuk halaman “Registration Agreement”, klik “I agree to these terms”. Isi formulir registrasi yang disediakan dan submit. Setelah itu, kembali lagi ke langkah nomor satu.
- 4.1.4. Login dan download “Windows Installer with Java” (marvinbeans-5_2_06-windows_with_jre.exe) ke C:\docking_plants.
- 4.1.5. Kopi file marvinbeans_5_2_05_1 dari CD gratis ke folder Program File di hardisk C, kemudian Klik pada Marvin Beans
- 4.1.6. Ikuti petunjuk instalasi dari Windows hingga selesai selesai (klik Next....dan



- 4.1.7. Saat Anda selesai melakukan instalasi, maka di desktop Anda akan muncul ikon MarvinSketch. Klik ikon tersebut.
- 4.1.8. Jika muncul jendela seperti di bawah ini, maka MarvinSketch dapat digunakan

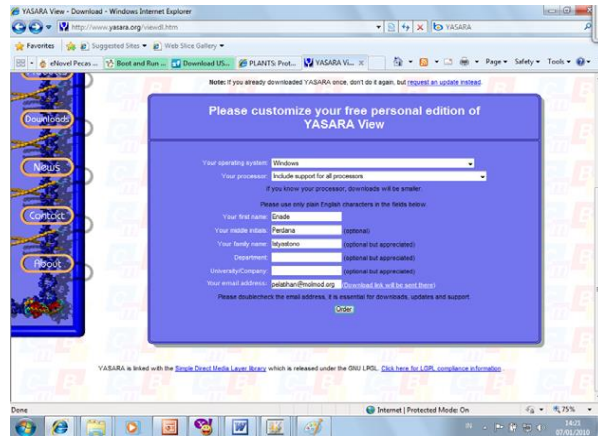


4.2. Download dan instalasi YASARA

Dalam buku ini disertai software YASARA lisensi Hari Purnomo, tetapi jika ingin mendapatkan lisensi dapat mengikuti langkah berikut.

Langkah-langkah:

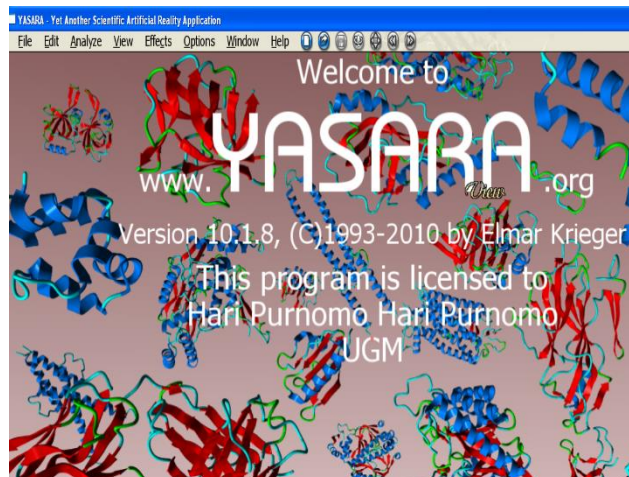
- 4.2.1 Dalam paket ini tersedia gratis software YASARA. Namun jika anda menginginkan nama anda tertulis saat pertama program YASARA dibuka , maka dapat mendownload sendiri (Langkah 1.4.2 sampai 1.4.4)
- 4.2.2. Buka link <http://www.yasara.org/viewdl.htm>
- 4.2.3. Isi formulir sesuai dengan kondisi dan situasi. Gunakan alamat email Anda yang valid, link untuk download akan dikirimkan oleh YASARA ke email tersebut.



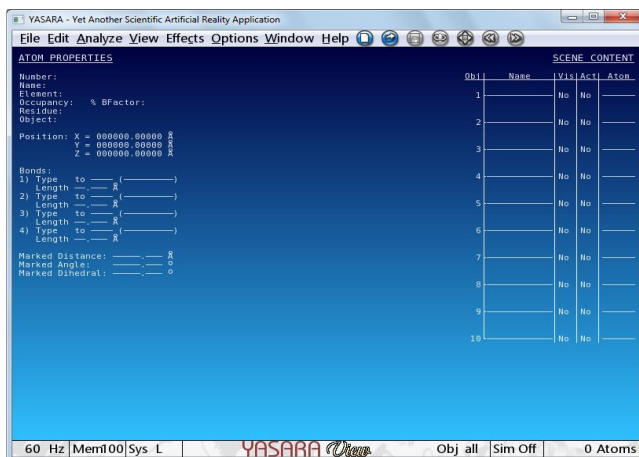
- 4.2.4. Masuk ke alamat email Anda. Download YASARA sesuai petunjuk di email Anda.

Simpan dalam C:\Program File

- 4.2.5. Kopi folder yasara dari CD gratis ke folder Program Fiel di hardisk C. Double click di ikon file YASARA tersebut. Muncul jendela notifikasi, klik “Run”
- 4.2.6. Folder baru YASARA akan muncul saat proses ekstraksi selesai dilakukan. Masuk ke folder tersebut, temukan file bernama “yasara.exe”. Kopi file tersebut sebagai shortcut ke desktop (klik kanan file > Copy > Ke Desktop > Paste Shortcut)
- 4.2.7. Klik ikon tersebut, muncul tampilan sebagai berikut:

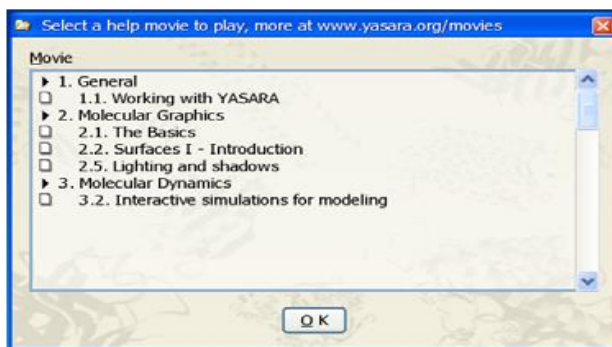


- 4.2.8. Tampilan akan segera berubah menjadi:



4.2.9. YASARA sudah siap digunakan

4.2.10. YASARA menyediakan movie interaktif untuk melatih pengguna agar familiar dengan YASARA. Klik HELP > Play Help Movie.



1.4.10. Pilih “1.1 Working with YASARA” dan klik “OK” untuk “crash course” tutorial YASARA selama 10 menit. Ikuti petunjuk dari movie tersebut