



THOMAS E. EXNER  
Universität Konstanz

<http://www.tcd.uni-konstanz.de/research/plants.php>

Fachbereich Chemie



- [Home](#)
- [INPHARMA Workshop](#)
  - [Registration](#)
  - [Location](#)
- [Group Members](#)
- [Open Positions](#)
- [Research](#)
  - [PLANTS](#)
  - [SPORES](#)
  - [pharmACOpore](#)
  - [ADMA](#)
- [Download](#)
- [Publications](#)
- [Molcad GmbH](#)



# PLANTS

## Protein-Ligand ANT System

O. Korb, T. Stütze, T.E. Exner

In the drug development process, predicting the complex structure of a small ligand with a protein, the so-called protein-ligand-docking-problem, is extensively used in virtual screening of large databases and in lead optimization. Given a protein structure, a ligand structure and a scoring function, the goal is to find a low energy ligand conformation in the protein's binding site that corresponds to the global minimum of the scoring function. The docking algorithm PLANTS is based on a class of stochastic optimization algorithms called ant colony optimization (ACO). ACO is inspired by the behavior of real ants finding a shortest path between their nest and a food source. The ants use indirect communication in the form of pheromone trails which mark paths between the nest and a food source. In the case of protein-ligand docking, an artificial ant colony is employed to find a minimum energy conformation of the ligand in the binding site. These ants are used to mimic the behavior of real ants and mark low energy ligand conformations with pheromone trails. The artificial pheromone trail information is modified in subsequent iterations to generate low energy conformations with a higher probability.



ligand translation  
ligand rotation

Activate Windows  
Go to Settings to activate Windows.  
[Show all](#)



# PLANTS

## Protein-Ligand ANT System

O. Korb, T. Stütze, T.E. Exner

***Aplikasi docking yang telah di-benchmark secara internal di grup penelitian Kimia Medisinal, Vrije Universiteit Amsterdam dengan GOLD (aplikasi docking berbayar yang dipakai secara rutin di laboratorium-laboratorium kimia medisinal di Eropa dan USA). Dari hasil benchmark diketahui PLANTS setara dengan GOLD untuk protokol skrining virtual di protein adrenergik B2 (ADRB2) dan lebih baik dari GOLD untuk protokol skrining virtual nikotinik asetilkolin binding protein (nAChBP).***

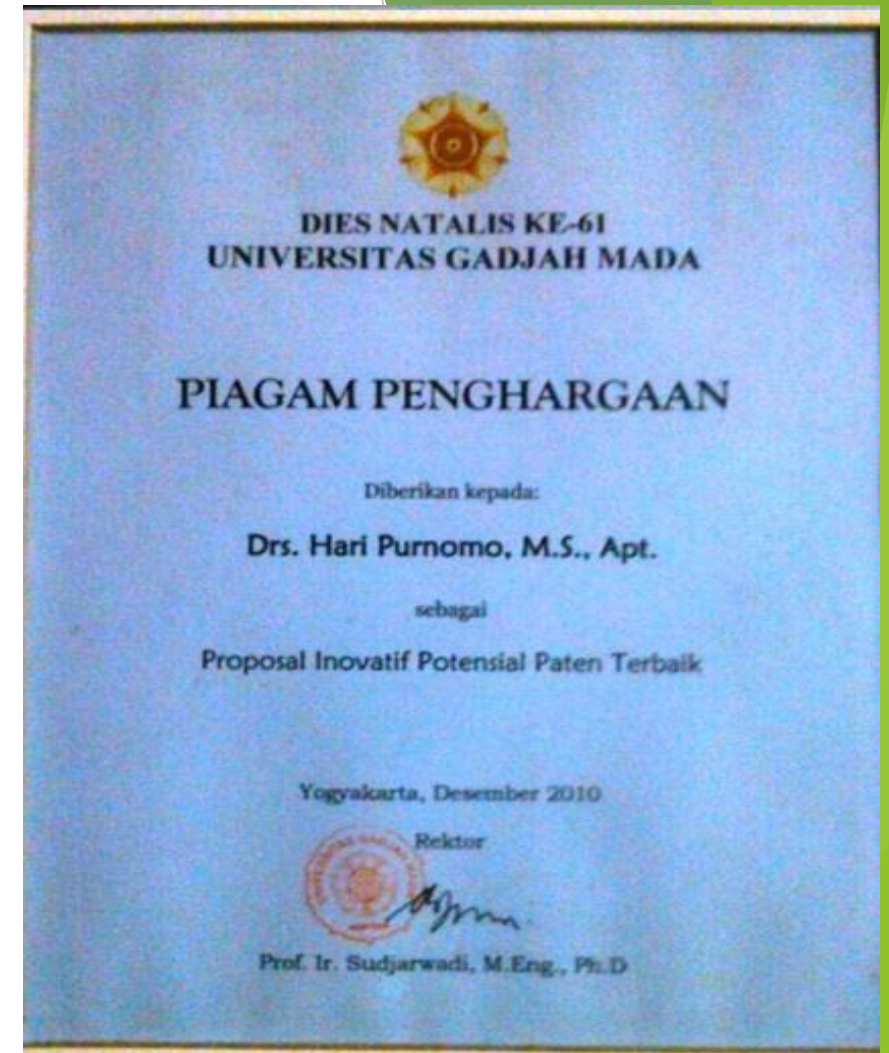
# KELEBIHAN PLANTS

- Dapat dioperasikan di windows bit64 maupun bit 32 dengan CMD hasil inovasi Satyo Nuryadi, S.T., M.Eng
- Free,praktis,sederhana dan mudah (cukup *single line command untuk simulasi*)
- Baik Protein maupun ligand bergerak [ MOE : hanya ligand yang bergerak]
- Hasil docking[pdb] dapat divisualisasi di software lain
- Skor docking puluhan sampai ratusan

# KELEMAHAN PLANTS

1. *PLANTS* tidak menyediakan fungsi preparasi protein, ligand maupun visualisasi. Diperlukan YASARA (preparasi protein dan ref\_ligand), dan SketchChem (preparasi ligand).
2. Perlu beberapa revisi atom











REPUBLIK INDONESIA  
KEMENTERIAN HUKUM DAN HAK ASASI MANUSIA

## SERTIFIKAT PATEN

Menteri Hukum dan Hak Asasi Manusia atas nama Negara Republik Indonesia berdasarkan Undang-Undang Nomor 13 Tahun 2016 tentang Paten, memberikan hak atas Paten kepada:

Nama dan Alamat Pemegang Paten : UNIVERSITAS GADJAH MADA  
LPPM UGM Gedung Pusat UGM Lt. 3  
Satep Barat Bulakumur Yogyakarta,  
INDONESIA

Untuk Inovasi dengan Judul : PROSES PEMBUATAN 1,3-BIS(PARA-  
HIDROKSIFENIL)UREA DAN PENGGUNAANNYA SEBAGAI  
ANALGETIKA-ANTIPIRETIKA

Inventor : Drs. Hari Purnomo, M. S., Apt.

Tanggal Penerimaan : 20 Desember 2013

Nomor Paten : IDP000051883

Tanggal Pemberian : 10 Juli 2018

Perlindungan Paten untuk inovasi tersebut diberikan untuk selama 20 tahun terhitung sejak Tanggal Penerimaan (Pasal 22 Undang-Undang Nomor 13 Tahun 2016 tentang Paten).

Sertifikat Paten ini dilampiri dengan deskripsi, klaim, abstrak dan gambar (jika ada) dari inovasi yang tidak terpisahkan dari sertifikat ini.



a.n. MENTERI HUKUM DAN HAK ASASI MANUSIA  
DIREKTUR JENDERAL KEKAYAAN INTELEKTUAL

*Freddy Harris*  
Dr. Freddy Harris, S.H., LL.M., ACCS.  
NIP. 196611181994031001



KEMENTERIAN HUKUM DAN HAK ASASI MANUSIA  
REPUBLIK INDONESIA  
DIREKTORAT JENDERAL KEKAYAAN INTELEKTUAL  
Jl. H.R. Rasuna Said Kav 3-9, Kuningan, Jakarta Selatan, 12940  
Telepon: (021) 57005611 Faksimili: (021) 57005611  
Laman: <http://www.djkg.go.id> Email: [dgpatent@djkg.go.id](mailto:dgpatent@djkg.go.id)

Nomor : H-03/HI.05/02.04/P00201200864/DP 74166 20 Januari 2021  
Lampiran : 1 (satu halaman)  
Hal : Pembentahan dapat diberi Paten

Yth, LPPM Universitas Gadjah Mada  
Kantor Pusat UGM Lantai 3 Satep Barat Bulakumur Yogyakarta  
INDONESIA,  
(Jy, Dr. Dth, R, Wianu Nurohoyo)

Dengan ini diberitahukan, bahwa sesuai dengan hasil pemeriksaan substansi terlampir, permohonan paten berikut ini dinyatakan dapat diberi Paten:

Nomor Pemohonan : P00201200864  
Tanggal Penerimaan : 14 November 2012  
Pemohon : LPPM Universitas Gadjah Mada  
Judul Inovasi : SENYAWA 1-(4-(DROKS)NAPHTALEN-4-IL)-3-(4-  
HIDROKSIFENIL)UREA (MH2011) DIGUNAKAN SEBAGAI  
PENGHILANG RASA SAKIT



H-202-2021

Desain Tata Letak  
untuk Produk Sahaja Dagang,  
Tata Letak Min Yusanli, M.S.  
NIP. 196407051962032001

### Tertandatangan

1. Yth, Direktur Jendral Kekayaan Intelektual (sebagai Laporan)
2. Dra. Ita Yukimartati, M.Si,  
NIP. 196603151965032001

File: R0014/01/2021  
13 Januari 2021

Lampiran 1

HASIL PEMERIKSAAN SUBSTANSI TAHAP AKHIR (diberi Paten)  
Nomor Pemohonan: P00201200864

1. Dengan ini diberitahukan bahwa:
  - a. deskripsi yang diterima adalah deskripsi:

<input type="checkbox"/>	halaman	1-5	seperti saat diajukan
<input checked="" type="checkbox"/>	halaman	1-5	sesuai surat Saudara tanggal 3 Desember 2020
  - b. klaim yang diterima adalah klaim:

<input type="checkbox"/>	nomor	1-3	seperti saat diajukan
<input checked="" type="checkbox"/>	nomor	1-3	sesuai surat Saudara tanggal 3 Desember 2020
  - c. gambar yang diterima adalah gambar:

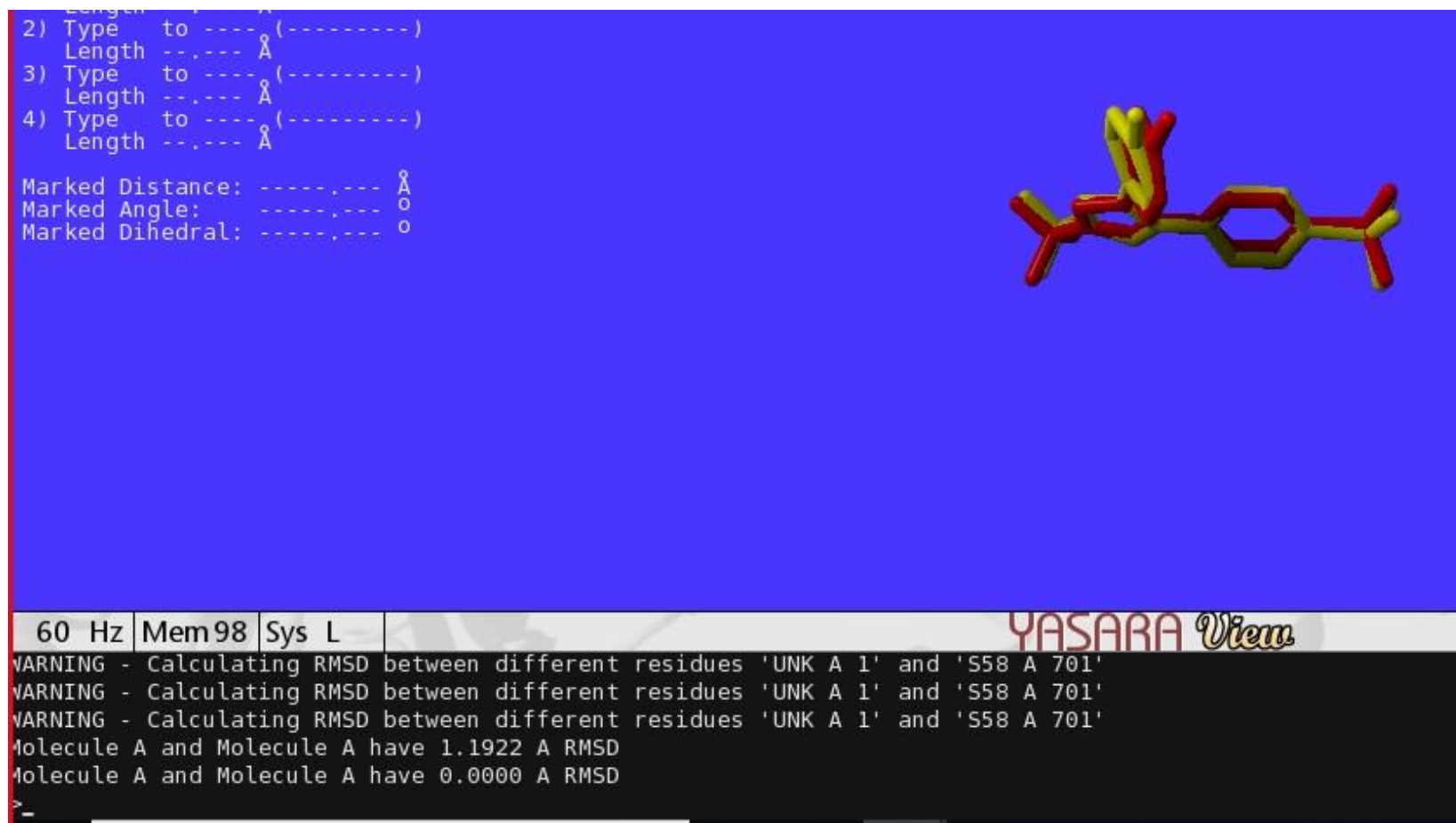
<input type="checkbox"/>	nomor	1-4	seperti saat diajukan
<input checked="" type="checkbox"/>	nomor	1-4	sesuai surat Saudara tanggal 3 Desember 2020
  - d. gambar untuk publikasi B adalah:
2. Deskripsi dan klaim serta gambar-gambar tersebut di atas dengan ini dinyatakan telah memenuhi ketentuan Pasal 2, Pasal 3, Pasal 5, dan ketentuan lain dalam Undang-undang Republik Indonesia Nomor 14 Tahun 2001 tentang Paten, sehingga permohonan paten ini dapat dipertimbangkan untuk diberi Paten.

Pemeriksa,

*Ita Yukimartati*

Dra. Ita Yukimartati, M.Si  
NIP. 196603151965032001

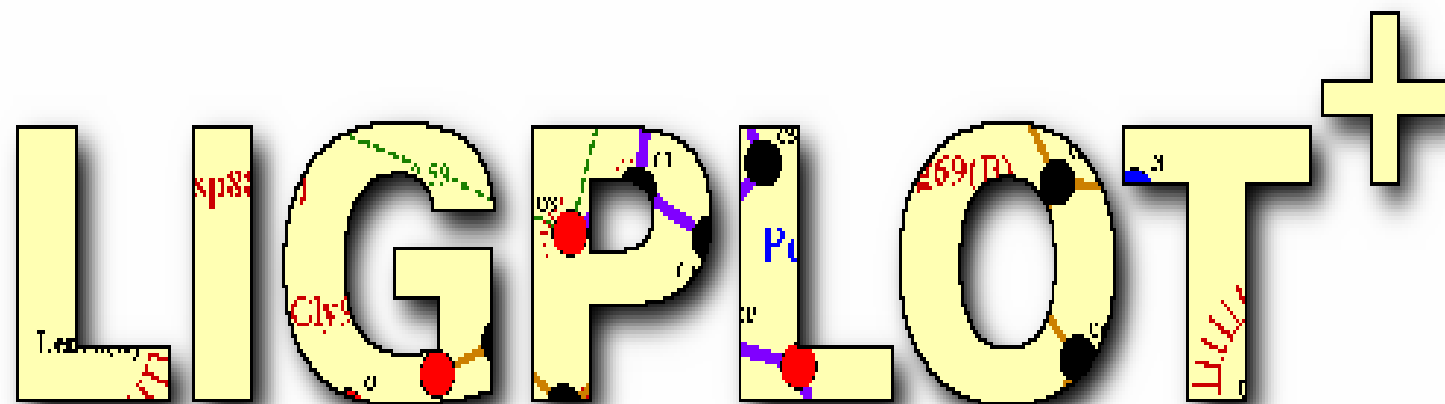






Uji T							
Doxorubicin	Mannotriose						
-52.0061	-64.8945	X1 Rerata	X2 Rerata	SD1	SD2	n1	n2
-31.1526	-52.6699	-43.84	-62.77	11.62	6.24	10.00	10.00
-52.4269	-65.637						
-53.0592	-71.388						
-30.6437	-56.203						
-29.4195	-61.7095						
-55.8107	-71.5416						
-51.3006	-61.5928						
-52.1546	-56.9641						
-30.473	-65.1092						
-43.84469	-62.77096						
11.62	6.24						

Harga Mutlak	$\alpha=0.005$	$\alpha=0.01$	$\alpha=0.025$	$\alpha=0.05$					
Thitung	Ttabel	Ttabel	Ttabel	Ttabel					
4.54	2.88	2.552	2.101	1.734					
T hitung > T tabel berarti ada perbedaan bermakna antara Doxorubicin dengan Mannotriose sebagai inh COX-2									



**Version v.2.2**

**LigPlot+ is a front-end for running and editing LIGPLOT and DIMPLOT schematic diagrams**

To start, use File->Open and select PDB file. For full instructions, go to Help->Manual.

