

ABSTRAK

STUDI *IN SILICO* AKTIVITAS SENYAWA DARI GENUS *ALPHITONIA* SEBAGAI ANTI-KANKER KOLOREKTAL MENGGUNAKAN *PLANTS*® (Oleh Rani Fatika Sari; Pembimbing Hafiz Ramadhan dan M. Hidayatullah; 2024; 136 Halaman)

Kanker kolorektal adalah kanker yang berasal dari jaringan usus besar. Kanker ini dimulai sebagai polip jinak tetapi dapat menjadi ganas dan merusak jaringan normal serta meluas ke dalam struktur sekitarnya. Salah satu penyebab munculnya polip tersebut adalah ekspresi berlebih dari EGFR dan diperparah dengan adanya ekspresi berlebih dari VEGFR. Tujuan penelitian ini untuk mengetahui potensi dan interaksi dari senyawa genus *Alphitonia* terhadap protein target dibandingkan dengan *native ligand* dan obat antikolorektal secara *in silico*. Metode yang digunakan adalah eksploratif dengan *computational experiment* dari 30 struktur 3D senyawa marker dan senyawa pilihan yang berasal dari genus *alphitonia* terhadap protein target 4HJO dan 2P2I menggunakan aplikasi *docking PLANTS*. Interaksi dari senyawa potensial genus *Alphitonia* dan memiliki kemiripan kedudukan asam amino pada reseptor 4HJO adalah senyawa *Isorhamnetin 3-O-rutinoside* dan *Rutin* dengan kemiripan terhadap *native* masing-masing sebesar 50% dan dibandingkan dengan obat pembanding (Cetuximab) yang memiliki kemiripan 58% dengan *native*. Sedangkan pada reseptor 2P2I senyawa yang memiliki kemiripan dengan *native* adalah β -Sitosterol (58%), *Stigmasterol* (50%), dan *Quercetin 3-O- β -D-glucopyranoside* (58%) dibandingkan dengan obat pembanding (Bevacizumab) yang memiliki kemiripan sebesar 58% dengan *native*. Kesimpulan dari penelitian ini yaitu terdapat 2 senyawa genus *alphitonia* yang paling berpotensi sebagai Anti-kanker kolorektal dengan mekanisme aksi pada protein 4HJO.

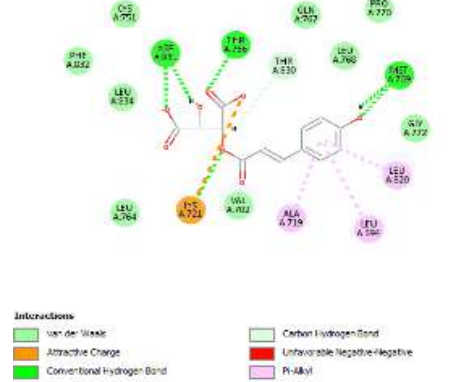
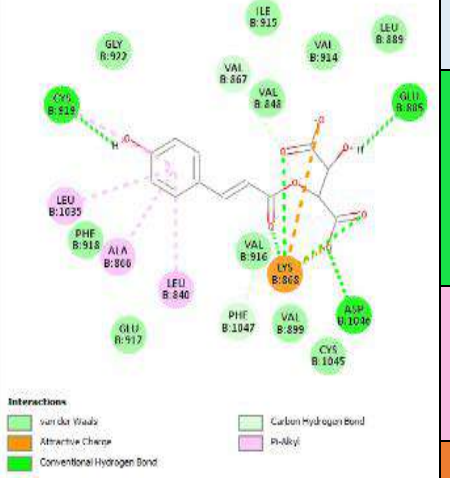
Kata Kunci: *Molecular Docking*, EGFR, VEGFR, *Alphitonia*, *PLANTS*

ABSTRACT

IN SILICO STUDY OF THE ACTIVITY OF ANIMALS FROM THE GENUS ALPHITONIA AS ANTI-COLORECTAL CANCER USING PLANTS® (By Rani Fatika Sari; Supervisors Hafiz Ramadhan and M. Hidayatullah; 2024; 136 Pages)

Colorectal cancer is cancer that originates in the tissues of the colon. It begins as a benign polyp but can become malignant and damage normal tissue and extend into surrounding structures. One of the causes of the appearance of these polyps is the overexpression of EGFR and exacerbated by the overexpression of VEGFR. The purpose of this study was to determine the potential and interaction of Alphonitonia genus compounds with target proteins compared to native ligands and anticancer drugs in silico. The method used is explorative with computational experiment of 30 3D structures of marker compounds and selected compounds derived from the genus Alphonitonia against target proteins 4HJO and 2P2I using PLANTS docking application. Interactions of potential compounds of the Alphonitonia genus and have similarity in amino acid position at the 4HJO receptor are Isorhamnetin 3-O-rutinoside and Rutin compounds with similarity to native each by 50% and compared to the comparator drug (Cetuximab) which has 58% similarity with native. While at the 2P2I receptor, the compounds that have similarities with native are β -Sitosterol (58%), Stigmasterol (50%), and Quercetin 3-O- β -D-glucopyranoside (58%) compared to the comparator drug (Bevacizumab) which has a similarity of 58% with native. The conclusion of this study is that there are 2 compounds of the genus alphonitonia that have the most potential as Anti-colorectal cancer with a mechanism of action on 4hjo protein.

Keywords: *Molecular Docking, EGFR, VEGFR, Alphonitonia, PLANTS*

							A:768 LYS A:704 VAL A: 702			
8	<i>3-O-p-Trans-7-Coumaroyl aphitolic acid</i>	1	-84.1539	-82.4614			THR A: 830	CYS B:919 GLU B:885 ASP B:1046		
		2	-84.3599	-82.9554				ASP A: 831 MET A: 769 THR A: 766 LYS A: 721	LYS B:868	
		3	-88.6126	-79.2032				ALA A: 719 LEU A: 694 LEU A: 820		LEU B:1035 ALA B:866 LEU B:840
		4	-88.5996	-78.309				LYS A: 721		PHE B:1047 VAL B:867
		5	-88.7004	-78.5425						VAL B:848 VAL B:916
		6	-88.401	-75.172						
		7	-84.2853	-84.0819						
		8	-83.5137	-84.3679						
		9	-88.4057	-77.5611						
		10	-84.2864	-80.0858						
9	<i>Rutin</i>	1	-104.489	-78.788			ALA A:719 LEU A:820	LYS B: 868		
		2	-99.421	-76.6357				VAL A:702	ILE B: 1019 ILE	
		3	-97.9603	-75.1807				MET A:769 LEU A:694	B: 892 ILE	