

ABSTRAK**STUDI DOCKING INHIBITOR DAN UJI TOKSISITAS *CYCLIN DEPENDENT KINASE 2* TERHADAP ANTIKANKER KOLON**

**Oleh :
Angga Argya Pratama
12171002**

Pengembangan obat antikanker diperlukan untuk memperoleh obat dengan aktivitas dan selektifitas yang lebih baik, pengembangan obat antikanker dengan berjalanya waktu dapat menggunakan metode *in silico*. *In silico* merupakan penemuan senyawa obat secara komputasi. Metode *In silico* yang dapat digunakan salah satunya yaitu metode docking dengan cara mendocking molekul. Overekspresi CDK-2 terjadi pada kanker kolon sehingga harus dihambat. Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji afinitas dan interaksi 32 senyawa tanaman herbal hasil skrinning dengan protein CDK-2 serta kestabilannya pada kondisi fisiologis tubuh dan juga yang berpotensi aktif sebagai obat antikanker kolon. Tahapan *docking* meliputi validasi *docking*, parameternya yakni nilai $RMSD \leq 2,0\text{\AA}$ dan *docking* terhadap 32 senyawa uji, parameternya yakni nilai energi bebas ikatan (ΔG) dan konstanta inhibisi (K_i). Hasil *docking* terbaik adalah senyawa ke 26 dengan nilai ΔG (energi bebas ikatan) $-7,53 \text{ kcal/mol}$ dan K_i (Konstanta inhibisi) $3,01 \text{ nM}$, senyawa kode ke 26 ini dapat dipercaya untuk dilakukan penelitian selanjutnya.

Kata Kunci : Kanker Kolon, Docking, CDK2

ABSTRACT**STUDY OF DOCKING AND TOXICITY TEST INHIBITOR CYCLIN
DEPENDENT KINASE 2 ON COLONIC ANTICANCER**

By:
Angga Argya Pratama
12171002

The development of anticancer drugs is needed to obtain drugs with better effectiveness and selectivity, the development of anticancer drugs over time can use the in silico method. In silico is a computational discovery of drug compounds. One of the In silico methods that can be used is the docking method by means of molecular docking. CDK-2 overexpression occurs in colon cancer and must be inhibited. This study aims to examine the affinity and interaction of 32 screened herbal plant compounds with CDK-2 protein and their stability under physiological conditions of the body and also those that may be active as colonic anticancer drugs. The docking stages include docking validation, the parameters are the RMSD value $2.0\text{\AA}$ and docking of the 32 test compounds, the parameters are the bond free energy value (ΔG) and the inhibition constant (K_i). The best docking result was compound 26 with ΔG (bond free energy) 7.53 kcal/mol and K_i (inhibition constant) 3.01 nM , this 26 code compound can be trusted for further research.

.Keywords: cancer colon, docking, CDK2