

**PENAMBATAN MOLEKUL DAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL
DARI METABOLIT *LAMINARIA JAPONICA* TERHADAP RESEPTOR
ANAPLASTIC LYMPHOMA KINASE (ALK) SEBAGAI KANDIDAT
SENYAWA PEMANDU ANTIKANKER PARU**

PUTRI REGINA

201FF03177

Program Studi S1 Farmasi, Fakultas Farmasi

Universitas Bhakti Kencana

ABSTRAK

Kanker paru-paru merupakan salah satu jenis kanker paling mematikan di dunia. Salah satu target terapi kanker paru-paru adalah reseptor *Anaplastic Lymphoma Kinase* (ALK), yang berperan penting dalam pertumbuhan dan penyebaran sel kanker. Penelitian ini mengeksplorasi potensi senyawa dari tanaman *Laminaria Japonica* yang dikenal memiliki berbagai senyawa bioaktif yang berpotensi sebagai antikanker dengan menargetkan reseptor ALK. Tujuan penelitian ini adalah untuk mengkaji afinitas dan kestabilan interaksi antara senyawa *Laminaria Japonica* terhadap reseptor ALK, serta untuk menilai potensinya sebagai agen antikanker paru-paru. Metode yang digunakan meliputi penambatan molekul menggunakan aplikasi AutoDock dengan parameter ΔG (Energi Bebas Ikatan) dan K_i (Konstanta Inhibisi), serta analisis dinamika molekul menggunakan aplikasi Gromacs dengan parameter RMSD, RMSF dan MMGBSA. Hasil penelitian dari 39 senyawa uji menunjukkan bahwa senyawa S13 (1,4-Cineole), S18 (β -Lonone), dan S26 (2(4H)-Benzofuranone) dari *Laminaria Japonica* memiliki potensi interaksi yang baik dengan reseptor ALK. Nilai penambatan molekul masing-masing adalah 0,32061 mM ; -4,77 kcal/mol, 0,12973 mM ; -5,30 kcal/mol, dan 0,332 mM ; -4,75 kcal/mol. Analisis dinamika molekul menunjukkan bahwa nilai ΔE_{TOTAL} untuk S13 (1,4-Cineole), S18 (β -Lonone), dan S26 (2(4H)-Benzofuranone) adalah -18,96 kcal/mol, -12,37 kcal/mol, dan -16,05 kcal/mol, yang tidak lebih negatif dari ligan uji. Kesimpulan dari penelitian ini adalah senyawa S13 (1,4-Cineole), S18 (β -Lonone), dan S26 (2(4H)-Benzofuranone) dari *Laminaria Japonica* memiliki afinitas yang baik dan interaksi yang stabil dengan reseptor ALK, menunjukkan potensi sebagai agen antikanker paru-paru.

Kata kunci: *Laminaria Japonica*, Kanker paru-paru, Reseptor ALK, Penambatan molekul, Simulasi dinamika molekul.

**DOCKING AND MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF
METABOLITS FROM LAMINARIA JAPONICA AGAINST ANAPLASTIC
LYMPHOMA KINASE (ALK) RECEPTOR AS A CANDIDATE FOR ANTI-
LUNG CANCER LEAD COMPOUND**

PUTRI REGINA

201FF03177

Undergraduate Program in Pharmacy, Faculty of Pharmacy

Bhakti Kencana University

ABSTRACT

Lung cancer is one of the deadliest types of cancer in the world. One of the therapeutic targets for lung cancer is the Anaplastic Lymphoma Kinase (ALK) receptor, which plays a crucial role in the growth and spread of cancer cells. This study explores the potential of compounds from the plant *Laminaria Japonica*, known to contain various bioactive compounds with anticancer potential, by targeting the ALK receptor. The objective of this research is to examine the affinity and stability of the interactions between *Laminaria Japonica* compounds and the ALK receptor, as well as to assess their potential as anti-lung cancer agents. The methods used include molecular docking with AutoDock software, evaluating ΔG (binding free energy) and K_i (Inhibition Constant) parameters, and molecular dynamics analysis using Gromacs software, assessing RMSD, RMSF, and MMGBSA parameters. The results from testing 39 compounds showed that compounds S13 (1,4-Cineole), S18 (β -Lonone), and S26 (2(4H)-Benzofuranone) from *Laminaria Japonica* exhibited good interaction potential with the ALK receptor. The molecular docking values were 0.32061 mM; -4.77 kcal/mol, 0.12973 mM; -5.30 kcal/mol, and 0.332 mM; -4.75 kcal/mol, respectively. Molecular dynamics analysis showed that the ΔE_{TOTAL} values for S13 (1,4-Cineole), S18 (β -Lonone), and S26 (2(4H)-Benzofuranone) were -18.96 kcal/mol, -12.37 kcal/mol, and -16.05 kcal/mol, which were not more negative than the test ligand. The conclusion of this study is that compounds S13 (1,4-Cineole), S18 (β -Lonone), and S26 (2(4H)-Benzofuranone) from *Laminaria Japonica* have good affinity and stable interactions with the ALK receptor, indicating their potential as anti-lung cancer agents.

Keywords: *Laminaria Japonica*, Lung cancer, ALK receptor, Molecular docking, Molecular dynamics simulation.