

## ABSTRAK

### **STUDI MOLECULAR DOCKING DAN MOLECULAR DINAMIKA SENYAWA FLAVONOL SEBAGAI INHIBITOR RESEPTOR B-CELL LYMPHOMA-2 (BCL- 2) PADA KANKER PARU-PARU SEL KECIL**

Oleh

**Reri Herliana**

**12151035**

Kanker paru merupakan kanker yang menyebabkan kematian paling umum dari kanker lainnya diseluruh dunia. Pada tahun 2012 diseluruh dunia diperkirakan ada 1,8 juta kasus kanker paru. Ekspresi Bcl-2 yang berlebihan akan meningkatkan ketahanan hidup sel kanker. Sehingga ekspresi Bcl-2 harus dihambat. Flavonoid sering diketahui manfaatnya sebagai antioksidan khususnya sebagai penangkap radikal bebas. Penelitian ini bertujuan mendapatkan gambaran interaksi antara senyawa uji dengan reseptor Bcl-2, kestabilannya dan prediksi toksisitasnya. Tahapan awal dilakukan validasi *docking* ligan alami, yang mendapatkan hasil valid dengan RMSD 1,639 Å, dilanjutkan tahapan *docking* terdapat 6 senyawa uji yang akan dilanjutkan tahap *molecular dynamic*. Hasil penelitian *docking* senyawa 8 dengan ( $\Delta G$ ) -37,739 Kj/mol dan Ki 0,246  $\mu$ M adalah senyawa terbaik. Sedangkan untuk hasil penelitian *molecular dynamic* dengan rentang waktu 50 nanodetik terdapat senyawa terbaik adalah senyawa 8 dengan ( $\Delta G$ ) -147,749 Kj/mol. Prediksi toksisitas dilakukan pada senyawa 8 dengan hasil mutagen, karsinogenik, dan resiko tinggi terhadap jantung.

Kata kunci: dinamika molekular, *docking* molekular, flavonol, Bcl-2

## **ABSTRACT**

### **STUDY OF MOLECULAR DOCKING AND MOLECULAR DYNAMICS OF FLAVONOID COMPOUNDS AS INHIBITOR OF B-CELL LYMPHOMA-2 (BCL-2) RECIPIENTS IN SMALL CELL LAB CANCER**

**By**

**Reri Herliana  
12151035**

Lung cancer is cancer that causes the most common deaths from other cancers worldwide. In 2012 throughout the world there are an estimated 1.8 million cases of lung cancer. Excessive expression of Bcl-2 will increase the survival of cancer cells. So that the expression Bcl-2 must be inhibited. Flavonoids are often known as antioxidant benefits, especially as free radical catchers. This study aims to obtain an overview of the interaction between the test compounds with Bcl-2 receptors, their stability, and predictions of toxicity. The initial stages of natural ligand docking were validated, which obtained a valid results with RMSD 1.639 Å, followed by docking stages, there were 6 test compounds which would be followed by molecular dynamic. The results of the docking study of compound 8 with ( $\Delta G$ ) -37.739 KJ / mol and  $K_i$  0.246  $\mu M$  were the best compounds. As for the results of research on molecular dynamics with a time span of 50 nanoseconds, the best compound is compound 8 with ( $\Delta G$ ) -147,749 KJ / mol. Toxicity predictions are coming out on compound 8 with the mutagenic, carcinogenic results and a high risk of heart disease.

*Keywords: molecular dynamics, molecular docking, flavonol, Bcl-2*