

PENAMBATAN MOLEKUL DAN DINAMIKA MOLEKUL SENYAWA TURUNAN XANTHONE SEBAGAI SENYAWA ANTI KANKER DARAH

Oleh: fariz haq faruqi

ABSTRAK

Kanker darah merupakan kanker yang menempati urutan ke sembilan terbanyak di Indonesia dimana 4,1% dari penduduk Indonesia mengidap penyakit ini. Xanthone diketahui memiliki aktivitas anti kanker, sehingga dapat diprediksi senyawa ini memiliki aktivitas dengan mekanisme menghambat pada protein target Bcl-2. Penelitian ini bertujuan mendapatkan gambaran interaksi senyawa uji dengan protein target Bcl-2 (PDB ID 6GL8) dan stabilitas interaksinya. Tahapan awal dilakukan penambatan molekul terhadap sepuluh senyawa uji turunan xanthone. Parameter penambatan molekul yang digunakan adalah nilai energi bebas ikatan (ΔG) dan konstanta inhibisi (K_i) dan kemudian analisis dilanjutkan dengan melakukan dinamika molekul terhadap senyawa uji dengan rentang waktu 50 nanodetik. Hasil penambatan molekul terbaik adalah senyawa uji turunan xanthone 8 nilai energi bebas ikatan (ΔG) dan konstanta inhibisi (K_i) berturut-turut adalah -6,55 kkal/mol dan 15,90 μM . Analisis dinamika molekul diperoleh nilai energi bebas ikatan (ΔG) terbaik dimiliki senyawa turunan xanthone 3 dengan nilai -22,46 kkal/mol. Disimpulkan bahwa senyawa turunan xanthone dapat membuat interaksi cukup baik antara protein target Bcl-2 dan senyawa uji turunan xanthone.

Kata Kunci: dinamika molekul, Bcl-2, xanthone, penambatan molekul

MOLECULAR DOCKING AND MOLECULAR DYNAMIC XANTHONE DEVIRATES AS ANTI BLOOD CANCER

By: fariz haq faruqi

ABSTRACT

Blood cancer is the type of cancer that ranks ninth most in Indonesia where 4.1% of Indonesia's population has this disease. xanthonenes are known to have anti-cancer activity, so it can be predicted that these compounds have inhibitory mechanism activity at Bcl-2 receptors . This study aims to obtain an overview of the interaction of test compounds with the target protein Bcl-2 (PDB ID 6GL8) and the stability of their interactions. The initial stages are docking against ten xanthone derivative test compounds. The docking parameters used are the value of bond-free energy (ΔG) and inhibition constants (k_i) and then the analysis is continued by carrying out molecular dynamics on the test compounds with a time span of 50 nanoseconds. The best docking results are xanthone derivative test compounds 8 value of bond-free energy (ΔG) and inhibition constants (k_i) are -6.55 kcal / mol and 15.90 μ M respectively. Molecular dynamics analysis obtained the best bond free energy value (ΔG) possessed by xanthone 3 derivative with a value of -22.46 kcal / mol. It was concluded that the xanthone derivative compounds can make a good interaction between the Bcl-2 target protein and the xanthone derivative test compound.

Keywords: molecular dynamics Bcl-2, xanthone, molecular docking