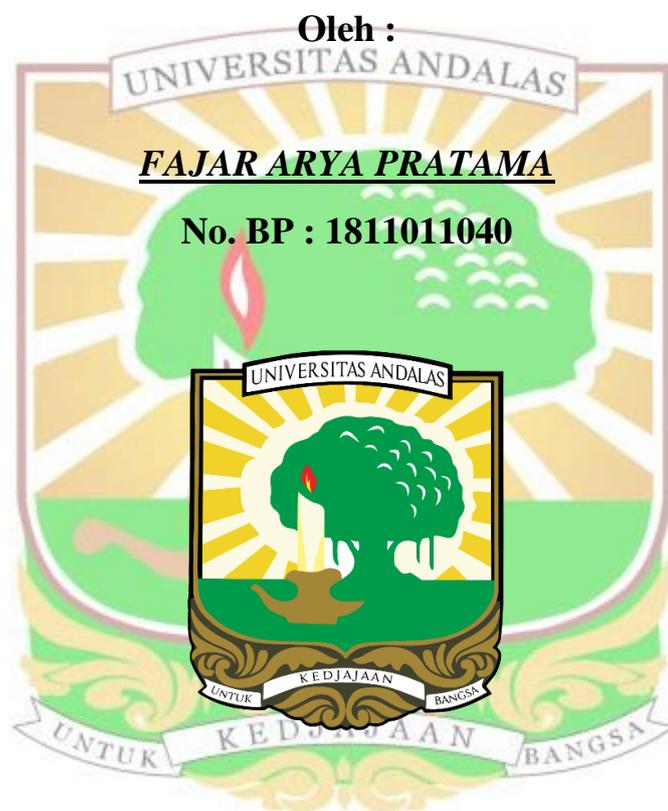


SKRIPSI SARJANA FARMASI

**POTENSI SENYAWA TETRAPRENILTOLUQUINONE
(TPTQ) DARI TANAMAN ASAM KANDIS (*Garcinia cowa*
Roxb) TERHADAP EKSPRESI BEBERAPA PROTEIN PADA
KANKER SECARA IN SILICO**

Oleh :



FAJAR ARYA PRATAMA

No. BP : 1811011040

Dosen Pembimbing 1 : Prof. apt. Dachriyanus, Ph. D

Dosen Pembimbing 2 : Dr. apt. Dira Hefni. M.Sc

**FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG**

2022

ABSTRAK

POTENSI SENYAWA TETRAPRENILTOLUQUINONE (TPTQ) DARI TANAMAN ASAM KANDIS (*Garcinia cowa Roxb*) TERHADAP EKSPRESI BEBERAPA PROTEIN PADA KANKER SECARA IN SILICO

Oleh :

FAJAR ARYA PRATAMA

NIM : 1811011040

(Program Studi Sarjana Farmasi)

Tetrapreniltoluquinone (TPTQ) merupakan senyawa turunan quinone berbentuk minyak kekuningan dan mempunyai 4 unit gugus isoprene yang terikat pada 5 geranil. Tujuan penelitian adalah untuk menjelaskan metode yang digunakan valid untuk menguji senyawa tetrapreniltoluquinone sebagai antikanker pada protein-protein kanker, menjelaskan nilai skor docking senyawa tetrapreniltoluquinone terhadap protein-protein kanker, serta menjelaskan ikatan antara senyawa tetrapreniltoluquinone dan protein-protein kanker. Protein-protein kanker (Kode PDB) di download di www.rcsb.com. Selanjutnya dipreparasi menggunakan aplikasi YASARA dan MarvinSketch, kemudian kode PDB di validasi menggunakan aplikasi PLANTS dan YASARA. Kode-kode PDB yang valid atau nilai RMSD < 2 Å. Dari hasil validasi didapatkan 17 kode PDB yang valid. Kemudian kode PDB yang telah valid tersebut di dockingkan dengan senyawa tetrapreniltoluquinone. Dari hasil docking antara senyawa tetrapreniltoluquinone dengan kode PDB yang valid, didapatkan tiga hasil docking terbaik yaitu senyawa tetrapreniltoluquinone dengan 2HV5 didapatkan skor docking -133,0320, dan tetrapreniltoluquinone dengan 1ZUA skor docking yang didapat sebesar -117,1690. Kemudian hasil visualisasi 2D didapatkan bahwa senyawa tetrapreniltoluquinone berikatan dengan stabil pada reseptor AKR1B10 dengan kode PDB 2HV5, terikat langsung dengan 10 asam amino membentuk ikatan hydrogen dan 14 asam amino membentuk ikatan hidrofobik. Serta, senyawa tetrapreniltoluquinone berikatan langsung pada reseptor AKR1B10 dengan kode PDB 1ZUA, terikat pada 4 asam amino yang membentuk ikatan hydrogen dan 15 asam amino membentuk ikatan hidrofobik. Sehingga dapat disimpulkan bahwa senyawa tetrapreniltoluquinone merupakan senyawa yang dapat berikatan dengan sangat stabil pada reseptor AKR1B10, yang merupakan reseptor kanker paru-paru kecil (small lung cancer).

Kata kunci : Tetrapreniltoluquinone, YASARA, PLANTS, Protein Kanker, AKR1B10, Kanker Paru-paru Kecil

ABSTRACT

POTENTIAL OF TETRAPRENILTOLUQUINONE (TPTQ) FROM KANDIS ACID PLANT (*Garcinia cowa* Roxb) ON THE EXPRESSION OF SOME PROTEINS CANCER IN SILICO

By :

FAJAR ARYA PRATAMA

NIM : 1811011040

(Bachelor of Pharmacy Study Program)

Tetraprenyltoluquinone (TPTQ) is a quinone derivative compound in the form of a yellowish oil and has 4 units of isoprene groups attached to 5 geranyls. The aims of the study were to explain the valid method used to test tetraprenyltoluquinone compounds as anticancer compounds on cancer proteins, to explain the docking score of tetraprenyltoluquinone compounds to cancer proteins, and to explain the bond between tetraprenyltoluquinone compounds and cancer proteins. Cancer proteins (PDB Code) can be downloaded at www.rcsb.com . Then it was prepared using the YASARA and MarvinSketch applications, then the PDB code was validated using the PLANTS and YASARA applications. Valid PDB codes or RMSD values < 2 . From the validation results obtained 17 valid PDB codes. Then the PDB code that has been valid is docked with a tetraprenyltoluquinone compound. From the docking results between tetraprenyltoluquinone compounds with a valid PDB code, the three best docking results were obtained, namely tetraprenyltoluquinone and 2HV5 with a docking score of -133.0320, and tetrapreniltoluquinone with a docking score of 1ZUA. -117.1690. Then the 2D visualization results showed that the tetraprenyltoluquinone compound binds stably to the AKR1B10 receptor with the PDB code 2HV5, directly bound to 10 amino acids to form hydrogen bonds and 14 amino acids to form hydrophobic bonds. Also, the tetraprenyltoluquinone compound binds directly to the AKR1B10 receptor with the PDB code 1ZUA, bound to 4 amino acids forming hydrogen bonds and 15 amino acids forming hydrophobic bonds. So it can be concluded that the tetraprenyltoluquinone compound is a compound that can bind very stable to the AKR1B10 receptor, which is a small lung cancer receptor.

Key word : Tetraprenyltoluquinone, YASARA, PLANTS, Cancer Protein, AKR1B10, Small Lung Cancer