

SKRIPSI SARJANA FARMASI
PREDIKSI INTERAKSI *ALFA MANGOSTIN* DAN DERIVATNYA
TERHADAP RESEPTOR *B-CELL LYMPHOMA 2* (BCL-2) PADA SEL
KANKER SECARA KOMPUTASI



OLEH:

AJUANDA PUTERI

1811012033

FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG 2022

ABSTRAK

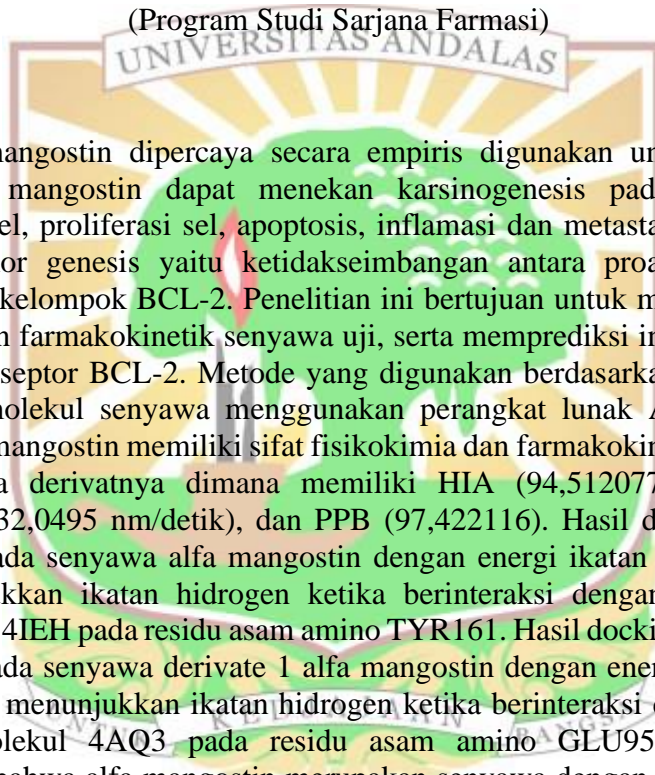
PREDIKSI INTERAKSI ALFA MANGOSTIN DAN DERIVATNYA TERHADAP RESEPTOR B-CELL LYMPHOMA 2 (BCL-2) PADA SEL KANKER SECARA KOMPUTASI

Oleh:

AJUANDA PUTERI

NIM: 1811012033

(Program Studi Sarjana Farmasi)



Alfa mangostin dipercaya secara empiris digunakan untuk pengobatan kanker. Alfa mangostin dapat menekan karsinogenesis pada semua tahap (pembelahan sel, proliferasi sel, apoptosis, inflamasi dan metastasis). Faktor lain penyebab tumor genesis yaitu ketidakseimbangan antara proapoptosis dan anti apoptosis dari kelompok BCL-2. Penelitian ini bertujuan untuk memprediksi sifat fisikokimia dan farmakokinetik senyawa uji, serta memprediksi interaksi senyawa uji terhadap reseptor BCL-2. Metode yang digunakan berdasarkan studi *in silico* penambatan molekul senyawa menggunakan perangkat lunak AutoDock Vina. Senyawa alfa mangostin memiliki sifat fisikokimia dan farmakokinetik yang paling tinggi diantara derivatnya dimana memiliki HIA (94,512077%), sel Caco2 *permeability* (32,0495 nm/detik), dan PPB (97,422116). Hasil docking terendah ditunjukkan pada senyawa alfa mangostin dengan energi ikatan -7,825 kkal/mol yang menunjukkan ikatan hidrogen ketika berinteraksi dengan sisi aktif dari makromolekul 4IEH pada residu asam amino TYR161. Hasil docking terendah juga ditunjukkan pada senyawa derivate 1 alfa mangostin dengan energi ikatan -4,285 kkal/mol yang menunjukkan ikatan hidrogen ketika berinteraksi dengan sisi aktif dari makromolekul 4AQ3 pada residu asam amino GLU95. Penelitian ini menunjukkan bahwa alfa mangostin merupakan senyawa dengan sifat fisikokimia dan farmakokinetik yang paling tinggi serta memiliki hasil docking paling rendah.

Kata Kunci: *Alfa mangostin*, BCL-2, Kanker, 4AQ3, 4IEH, AutoDock Vina

ABSTRACT

INTERACTION PREDICTION *ALFA MANGOSTIN* AND ITS DERIVATIVES
ON B-CELL LYMPHOMA 2 (BCL-2) RECEPTORS IN CELLS
COMPUTATIONAL CANCER

By:

AJUANDA PUTERI

ID: 1811012033

(Bachelor of Pharmacy Study Program)

Alpha mangostin is believed to be empirically used for the treatment of cancer. Alpha mangostin can suppress carcinogenesis at all stages (cell division, cell proliferation, apoptosis, inflammation and metastasis). Another factor causing tumor genesis is the imbalance between pro-apoptosis and anti-apoptosis of the BCL-2 group. This study aims to predict the physicochemical and pharmacokinetic properties of the test compound, as well as predict the interaction of the test compound with the BCL-2 receptor. The method used is based on the study *in silico* docking of compound molecules using AutoDock Vina software. Alpha mangostin compounds have the highest physicochemical and pharmacokinetic properties among their derivatives which have HIA (94.512077%), Caco2 cells. *permeability*(32.0495 nm/sec), and PPB (97.422116). The lowest docking results were shown in the alpha mangostin compound with a bond energy of -7.825 kcal/mol which showed hydrogen bonds when interacting with the active site of the 4IEH macromolecule on the amino acid residue TYR161. The lowest docking results were also shown in the derivative 1 alpha mangostin compound with a bond energy of -4.285 kcal/mol which showed hydrogen bonds when interacting with the active site of the 4AQ3 macromolecule on the amino acid residue GLU95. This study showed that alpha mangostin was the compound with the highest physicochemical and pharmacokinetic properties and had the lowest docking yield.

Keywords: *Alpha mangostin*, BCL-2, Cancer, 4AQ3, 4IEH, AutoDock Vina

