

**SIMULASI MOLEKULAR DUA SENYAWA ISOLAT JAMUR (*Aspergillus unguis*)  
SIMBION SPONS LAUT (*Aaptos suberitoides*) UNTUK ANTI *TRIPLE NEGATIVE*  
*BREAST CANCER***

**SKRIPSI SARJANA KIMIA**

**Oleh :**

**Yuma Nur Alfath**

**NO BP : 1910412020**



**DEPARTEMEN KIMIA**

**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM**

**UNIVERSITAS ANDALAS**

**PADANG**

**2023**

**INTISARI**  
**SIMULASI MOLEKULAR DUA SENYAWA ISOLAT JAMUR (*Aspergillus unguis*)**  
**SIMBION SPONS LAUT (*Aptos suberitoides*) UNTUK ANTI *TRIPLE NEGATIVE***  
***BREAST CANCER***

Oleh:

Yuma Nur Alfath (1910412020)

Dr. rer. nat Syafrizayanti\*, Prof. Dr. Mai Efdi\*

Pembimbing\*

*Triple negative breast cancer* merupakan subtipe kanker payudara yang paling agresif dengan menyumbang sekitar 15 – 20% dari semua karsinoma payudara. Upaya pengobatan dan pencegahan kanker payudara terus dikembangkan diantaranya dengan terapi target molekuler menggunakan obat-obatan untuk menargetkan molekul tertentu untuk memblokir pertumbuhan dan penyebaran sel kanker. Terapi target molekul dapat diimplementasikan menggunakan simulasi komputasi dengan *in silico* yaitu dengan metode molecular docking. Pada penelitian ini dipelajari dua senyawa isolat jamur *Aspergillus unguis* yaitu [4-hydroxy-6-(4-hydroxyphenoxy)-2-oxo-1,3,5-oxadithiepan-7-yl]methylacetate dan 4-hydroxy-7-(hydroxymethyl)-6-(4hydroxyphenoxy)-1,3,5-oxadithiepan-2-one. Metode molekular docking dimulai dengan melakukan *screening* protein target melalui berbagai cara salah satunya dengan studi literatur, kedua senyawa beserta protein target dilakukan minimalisasi energi dengan molekular dinamis sehingga kedua senyawa dan protein target dapat dipersiapkan untuk simulasi molekular *docking*. Simulasi molekular *docking* bertujuan untuk melihat interaksi dengan protein target seperti protein PARP, CDK, VEGFR dan EGFR. Interaksi dinilai dengan melihat afinitas ikatan dan stabilitas konformasi yang terbentuk. Nilai afinitas ikatan dilihat dari docking score, docking score pada senyawa isolat berada pada rentang  $> 6.0 \text{ kcal.mol}^{-1}$  dan  $< 9.0 \text{ kcal.mol}^{-1}$  dengan nilai tertinggi  $-8.4542 \text{ kcal.mol}^{-1}$  pada protein CDK, nilai ini tidak jauh berbeda dengan senyawa pembanding berupa obat yang telah diuji klinis seperti Palbociclib dan Lapatinib. Dari berbagai data senyawa hasil isolasi jamur *Aspergillus unguis* seperti, nilai *Docking Score*, bioavailabilitas dan ADME dapat disimpulkan senyawa hasil isolat berpotensi sebagai inhibitor TNBC.

**Kata Kunci:** *Triple negative breast cancer, Molecular Docking, Aspergillus unguis*

## ABSTRACT

### MOLECULAR SIMULATION OF TWO COMPOUNDS ISOLATED FROM THE FUNGUS (*Aspergillus unguis*) SYMBIONT SEA SPONGE (*Aaptos suberitoides*) FOR ANTI-TRIPLE NEGATIVE BREAST CANCER

By:

Yuma Nur Alfath (1910412020)

Dr. rer. nat Syafrizayanti\*, Prof. Dr. Mai Efdi\*

\*Supervisor

Triple negative breast cancer is the most aggressive subtype of breast cancer, contributing about 15-20% of all breast carcinomas. Efforts to develop breast cancer treatment and prevention include molecular targeted therapy using drugs to target specific molecules to block the growth and spread of cancer cells. Molecular targeted therapy can be implemented using computer simulations with in silico molecular docking methods. In this study, two compounds isolated from the fungus *Aspergillus unguis* were studied, namely [4-hydroxy-6-(4-hydroxyphenoxy)-2-oxo-1,3,5-oxadithiepan-7-yl]methylacetate and 4-hydroxy-7-(hydroxymethyl)-6-(4hydroxyphenoxy)-1,3,5-oxadithiepan-2-one. The molecular docking method began with screening the target protein through various means, including literature studies. Both compounds and the target protein were subjected to energy minimization using molecular dynamics, so that both compounds and the target protein could be prepared for molecular docking simulation. The molecular docking simulation aims to observe the interaction with the target protein such as PARP, CDK, VEGFR, and EGFR. The interaction was evaluated by looking at the binding affinity and stability of the formed conformation. The binding affinity value was determined from the docking score, and the docking score of the isolated compounds ranged from  $> 6.0$  kcal.mol<sup>-1</sup> to  $< 9.0$  kcal.mol<sup>-1</sup>, with the highest value being  $-8.4542$  kcal.mol<sup>-1</sup>. This value is not significantly different from the clinical trial-tested drugs such as Palbociclib and Lapatinib. From various data on the isolated compounds of *Aspergillus unguis*, such as Docking Score, Bioavailability, and ADME, it can be concluded that the isolated compounds have the potential as TNBC inhibitors.

**Keywords:** *Triple negative breast cancer, Molecular Docking, Aspergillus unguis*