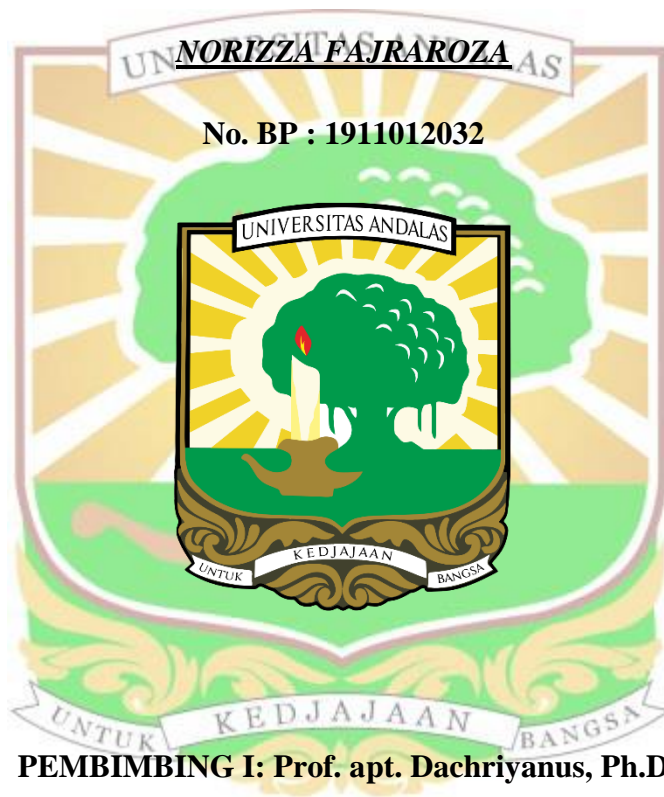


SKRIPSI SARJANA FARMASI

**POTENSI SENYAWA RUBRAXANTHONE DARI TANAMAN ASAM
KANDIS (*Garcinia cowa* Roxb) TERHADAP EKSPRESI BEBERAPA
PROTEIN SEBAGAI ANTIKOLESTEROL SECARA IN SILICO**

Oleh:



PEMBIMBING I: Prof. apt. Dachriyanus, Ph.D

PEMBIMBING II: Dr. apt. Dira Hefni, S.Farm, M.Sc

FAKULTAS FARMASI

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2024

ABSTRAK

POTENSI SENYAWA RUBRAXANTHONE DARI TANAMAN ASAM KANDIS (*Garcinia cowa* Roxb) TERHADAP EKSPRESI BEBERAPA PROTEIN SEBAGAI ANTIKOLESTEROL SECARA IN SILICO

Oleh:

NORIZZA FAJRAROZA

NIM : 1911012032

(Program Studi Sarjana Farmasi)

Rubraxanthone merupakan senyawa yang dapat diisolasi dari kulit batang *Garcinia cowa* Roxb atau yang dikenal dengan tanaman asam kandis. Tujuan penelitian ini adalah untuk mendapatkan nilai skor docking senyawa, ikatan antara senyawa rubraxanthone dengan protein-protein kolesterol, serta menjelaskan mekanisme kerja rubraxanthone sebagai antikolesterol secara in silico. Protein target diunduh pada situs Protein Data Bank yang kemudian dipreparasi menggunakan aplikasi YASARA dan MarvinSketch, kemudian protein target divalidasi menggunakan aplikasi PLANTS dan YASARA. Kemudian dilakukan pencarian situs aktif ikatan pada reseptor yang nantinya akan dibandingkan dengan visualisasi dua dimensi untuk melihat ikatan yang terjadi antara reseptor dan ligan. Terdapat 31 protein target yang divalidasi dan didapatkan 13 buah protein target yang valid atau memiliki nilai RMSD $< 2 \text{ \AA}$. Dari hasil docking antara senyawa rubraxanthone dengan protein target yang valid, didapatkan dua hasil docking yang baik yaitu senyawa Rubraxanthone dengan reseptor 3LEE dengan skor docking sebesar -85.2268 dan dengan reseptor 4BCR dengan skor docking sebesar -83.7616. Di antara kedua reseptor tersebut, 3LEE memiliki skor docking yang jauh lebih baik daripada native ligand dibandingkan dengan 4BCR. Menurut visualisasi dua dimensi menggunakan LigPlus, Rubraxanthone memiliki 15 ikatan asam amino dengan protein dengan kode PDB 3LEE. Dari 15 ikatan tersebut terdapat 4 asam amino yang membentuk ikatan hidrogen dan 11 asam amino yang membentuk ikatan hidrofobik. Dari hasil visualisasi dua dimensi dapat diprediksi secara in silico bahwa senyawa Rubraxanthone bekerja sebagai antikolesterol dengan cara berikatan baik dengan sisi aktif protein squalene synthase yaitu asam amino Phe288, Tyr171, dan Gln212, terutama asam amino Phe54 yang merupakan situs inhibisi protein squalene synthase dengan kode PDB 3LEE yang berperan dalam pembentukan squalene yang hasil akhirnya berupa kolesterol.

Kata kunci: Rubraxanthone, YASARA, PLANTS, Protein Kolesterol, 3LEE, Squalene Synthase

ABSTRACT

THE POTENTIAL OF THE RUBRAXANTHONE COMPOUND FROM THE KANDIS ACID PLANT (*Garcinia cowa* Roxb) ON THE EXPRESSION OF SOME PROTEINS AS ANTICHOLESTEROL IN SILICO

By:

NORIZZA FAJRAROZA

Student ID : 1911012032

(Bachelor of Pharmacy)

Rubraxanthone is a compound that can be isolated from the bark of *Garcinia cowa* Roxb or known as the asam kandis plant. The purpose of this study was to obtain the docking score of the compound, the bond between the rubraxanthone compound and cholesterol proteins, and to explain the mechanism of action of rubraxanthone as anti cholesterol in silico. The target protein was downloaded from the Protein Data Bank site which was then prepared using the YASARA and MarvinSketch applications, and then the target protein was validated using the PLANTS and YASARA applications. Then a search was carried out for the active binding site on the receptor which would later be compared with two-dimensional visualization to see the bond that occurs between the receptor and the ligand. There were 31 validated target proteins and 13 valid target proteins or had an RMSD value of $<2 \text{ \AA}$. From the docking results between rubraxanthone compounds and valid target proteins, two good docking results were obtained, namely the Rubraxanthone compound with the 3LEE receptor with a docking score of -85.2268 and with the 4BCR receptor with a docking score of -83.7616. Between the two receptors, 3LEE has a much better docking score than the native ligand compared to 4BCR. According to two-dimensional visualization using LigPlus, Rubraxanthone has 15 amino acid bonds with proteins with the PDB code 3LEE. Of the 15 bonds, there are 4 amino acids that form hydrogen bonds and 11 amino acids that form hydrophobic bonds. From the results of two-dimensional visualization, it can be predicted via in silico that the Rubraxanthone compound works as an anti-cholesterol by binding well to the active side of the squalene synthase protein, namely the amino acids Phe288, Tyr171, and Gln212, especially the amino acid Phe54 which is the inhibition site of the squalene synthase protein with the PDB code 3LEE which plays a role in the formation of squalene, the final result of which is cholesterol.

Kata kunci: Rubraxanthone, YASARA, PLANTS, Cholesterol Protein, 3LEE, Squalene Synthase