

SKRIPSI SARJANA FARMASI
PENGUNAAN *NETWORK PHARMACOLOGY* DAN PENAMBATAN
MOLEKUL DALAM ANALISIS SENYAWA AKTIF DARI *Uncaria*
***tomentosa* L. TERHADAP KANKER KOLOREKTAL**



Oleh:

AULIA RAHMI

NIM: 2111012052

Pembimbing I : apt. Purnawan Pontana Putra, S.Si, M.Si

Pembimbing II : Prof. Dr. apt. Dachriyanus, M. Si

FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG

2025

ABSTRAK

PENGUNAAN *NETWORK PHARMACOLOGY* DAN PENAMBATAN MOLEKUL DALAM ANALISIS SENYAWA AKTIF DARI *Uncaria tomentosa* L. TERHADAP KANKER KOLOREKTAL

Oleh:

AULIA RAHMI

NIM : 2111012052

(Program Studi Sarjana Farmasi)

Kanker merupakan salah satu penyakit tidak menular (PTM) dengan angka kematian tertinggi di dunia, salah satu jenis kanker yang banyak ditemukan adalah kanker kolorektal. Meskipun kemajuan pengobatan kanker telah dicapai, pengobatan tradisional masih menjadi pilihan bagi mayoritas masyarakat Indonesia. Salah satu tanaman obat yang dipercaya berpotensi sebagai pengobatan kanker adalah cakar kucing (*Uncaria tomentosa* L.). Penelitian ini bertujuan untuk mengeksplorasi potensi *U. tomentosa* L. sebagai antikanker kolorektal melalui analisis *network pharmacology* dan simulasi *molecular docking*. Senyawa yang diidentifikasi diantaranya adalah speciophylline, isomitraphylline, mitraphylline, rhynchophylline, isorhynchophylline, (-)- epicatechin, (+)- epicatechin, corynoxine, uncarine C, uncarine E, dan uncarine F. Berdasarkan analisis *network pharmacology* dan *enrichment analysis* didapatkan target protein mTOR dan JUN berpotensi mempengaruhi proses molekular yang berkaitan dengan kanker kolorektal. Sebelum melakukan simulasi *docking* target dipersempit dengan memilih mTOR sebagai target utama dengan dua kode PDB yaitu 4DRI dan 5GPG. Berdasarkan hasil validasi *docking* diperoleh protein dengan kode PDB 4DRI memiliki nilai RMSD <2 Å sehingga metode *docking* dinyatakan valid. Simulasi *molecular docking* dengan *deep learning* pada target 4DRI dengan *native ligand* imunosupresan rapamycin menunjukkan nilai afinitas sebesar -11,30 kcal/mol. Sedangkan senyawa dengan selisih terdekat yaitu isorhynchophylline menunjukkan afinitas sebesar -7,44 kcal/mol. Hasil simulasi ini menunjukkan, *native ligand* masih menunjukkan nilai yang lebih stabil daripada senyawa aktif lainnya sebagai penghambat pada jalur mTOR.

Kata kunci: kanker kolorektal, *U. tomentosa* L., *network pharmacology*, *deep learning*, *molecular docking*

ABSTRACT

THE USE OF NETWORK PHARMACOLOGY AND MOLECULAR DOCKING IN THE ANALYSIS OF ACTIVE COMPOUNDS FROM *Uncaria tomentosa* L. AGAINST COLORECTAL CANCER

By:

AULIA RAHMI

Student ID Number : 2111012052

(Bachelor of Pharmacy)

Cancer is one of the non-communicable diseases (NCDs) with the highest mortality rate in the world, one type of cancer that is commonly found is colorectal cancer. Although advances in cancer treatment have been achieved, traditional medicine is still an option for the majority of Indonesians. One of the medicinal plants believed to have potential as a cancer treatment is cat's claw (*Uncaria tomentosa* L.). This study aims to explore the potential of *U. tomentosa* L. as colorectal anticancer through network pharmacology analysis and molecular docking simulation. The compounds identified include speciophylline, isomitraphylline, mitraphylline, rhynchophylline, isorhynchophylline, (-)-epicatechin, (+)-epicatechin, corynoxine, uncarine C, uncarine E, and uncarine F. Based on network pharmacology analysis and enrichment analysis, it was found that mTOR and JUN protein targets have the potential to affect molecular processes related to colorectal cancer. Before performing docking simulation, the target was narrowed down by selecting mTOR as the main target with two PDB codes, namely 4DRI and 5GPG. Based on the results of docking validation, the protein with PDB code 4DRI has RMSD value <2 Å so that the docking method is declared valid. Simulation of molecular docking with deep learning on 4DRI target with native ligand immunosuppressant rapamycin showed affinity value of -11.30 kcal/mol. While the compound with the closest difference isorhynchophylline showed an affinity of -7.44 kcal/mol. The results of this simulation show that the native ligand still shows a more stable value than other active compounds as an inhibitor of the mTOR pathway.

Keywords: colorectal cancer, *U. tomentosa* L., network pharmacology, deep learning, molecular docking