

Analisis in silico aktivitas saponin dan 2,5-piperazindion dari organisme laut terhadap inhibitor MDM2 dan aktivator procaspase-3 = In silico activity analysis of saponins and 2,5-piperazinedione from marine organism against MDM2 inhibitor and procaspase-3 activator

Indah Pratiwi, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20458087&lokasi=lokal>

Abstrak

Kanker merupakan suatu penyakit yang dapat terjadi karena adanya kegagalan apoptosis. Kegagalan apoptosis ini disebabkan karena MDM2 menghambat aktivitas dari p53 sehingga procaspase-3 tidak teraktivasi menjadi caspase-3. Saat ini, pengobatan kanker telah banyak diterapkan. Namun pengobatan yang lebih efektif selalu dibutuhkan karena penyakit kanker terus bermutasi. Pencarian pun dilakukan dari sumber-sumber alam termasuk yang berasal dari laut. Pencarian senyawa bioaktif dari organisme laut ini tidaklah mudah sebab membutuhkan waktu yang lama dan biaya yang tidak murah. Oleh karena itu, digunakan pengujian secara in silico.

Pada penelitian ini dilakukan penambatan senyawa bioaktif yang berasal dari saponin dan 2,5-piperazindion terhadap inhibitor MDM2 dan aktivator procaspase-3 dengan menggunakan parameter AutoDock dan Vina. Dari hasil penambatan, senyawa bioaktif terbaik yang direkomendasikan ialah yang memiliki energi bebas ikatan rendah yaitu 18-Oxotryprostatin A dan Intercedenside A sebagai Inhibitor MDM2 serta 6-Methoxyspirotryprostatin B dan Frondoside A sebagai aktivator procaspase-3.

.....

Cancer is a disease that can occur because of apoptosis failure. The cause of apoptosis failure is MDM2, which can inhibit the activity of p53 so procaspase 3 can not be activated to caspase 3. Currently, the treatment of cancer has been applied widely. But the effective treatment always needed because cancer has been mutated. One of the treatments is the search of natural resources that comes from the sea. The search for bioactive compound from marine organisms is not easy because it takes a long time and the cost is not cheap. Therefore, in silico method is used.

In this research, we employed docking of bioactive compounds from saponin and 2,5 piperazinedione towards MDM2 inhibitor and procaspase 3 activator will be performed by using AutoDock and Vina. Based on the docking results, best recommended bioactive compounds are those who have low binding energy, they are 18 Oxotryprostatin A and Intercedenside A as MDM2 Inhibitor and 6 Methoxyspirotryprostatin B and Frondoside A as procaspase 3 activator.