

Analisis simulasi dinamika molekuler hasil penapisan virtual biota fungi laut terhadap inhibitor EGFR dan VEGFR-2 pada kanker paru karsinoma bukan sel kecil = Molecular dynamic simulation analysis of marine fungi compounds against EGFR and VEGFR-2 inhibitory activity in non small cell lung cancer

Kinanti Khansa Chavarina Dwi Kartono, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20459181&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Menurut International Agency for Research on Cancer IARC, penderita kanker paru telah mencapai 1,8 juta jiwa dan 85 berkontribusi pada kanker paru jenis karsinoma bukan sel kecil. Dalam beberapa tahun belakangan, penelitian terhadap terapi tertarget sedang dikembangkan karena terbukti memiliki hasil terapi yang lebih efektif dan kemungkinan efek samping yang lebih sedikit. Perkembangan penelitian terhadap biota fungi laut belum banyak dieksplorasi dalam pengobatan kanker paru bukan sel kecil. Pada penelitian ini dilakukan simulasi dinamika molekuler pada senyawa biota fungi laut hasil penapisan virtual terhadap makromolekul EGFR FU0015, FU0051, dan FU0202 dan VEGFR-2 FU0033 untuk melihat aktivitas inhibisi sebagai agen antiproliferatif dan antiangiogenesis menggunakan AutoDock dan AMBER dalam suhu 300K dan 310K yang dibandingkan dengan kontrol positif EGFR Gefitinib, Erlotinib, and Imatinib dan VEGFR-2 Nikotinamid dan Vatalanib. Hasil simulasi dinamika molekuler terhadap inhibitor EGFR pada suhu 310K menunjukkan energi bebas MMGBSA dan okupansi ikatan hidrogen tertinggi dimiliki oleh FU0051 -43,72 kkal/mol; 98,80 diikuti oleh FU0202 -31.64 kkal/mol; 49,35, dan FU0015 -15,55 kkal/mol; 3,35. Fungi FU0033 sebagai bahan uji inhibitor VEGFR-2 pada suhu 310K memiliki nilai energi bebas MMGBSA yang lebih besar dibandingkan kontrol positifnya dan okupansi ikatan hidrogen yang rendah 0,15. Data penelitian menunjukkan senyawa FU0051 dan FU0202 memiliki potensi untuk menjadi calon agen antiproliferasi sehingga layak diuji in vitro.

<hr>

ABSTRACT

According to International Agency for Research on Cancer IARC, the number of lung cancer patients has reached 1,8 million lives and 85 of the number contribute to non small cell lung cancer. In the past years, research on targeted therapy has been developed due to its efficacy and a small number of side effects. Research on marine fungi compounds has not been explored to non small cell lung cancer therapy. This research uses molecular dynamic simulation method to marine fungi compounds that have been docked to EGFR FU0015, FU0051, FU0202 and VEGFR 2 FU0033 as antiproliferative and antiangiogenetic agent by inhibition activity using AutoDock and AMBER at 300K and 310K temperature using EGFR Gefitinib, Erlotinib, and Imatinib and VEGFR 2 Nicotinamide and Vatalanib as reference standards. Molecular dynamics results for EGFR inhibitors at 310K shows the best MMGBSA free energy and hydrogen occupancy in FU0051 43,72 kcal mol 98,80 followed by FU0202 31.64 kcal mol 49,35 , and FU0015 15,55 kcal mol 3,35. FU0033 fungi as a material for VEGFR 2 inhibitor shows higher MMGBSA free energy in compare to its reference standards and low hydrogen occupancy 0,15 at 310K. This research shows that FU0051 and FU0202 have potential to be an antiproliferative agent candidate, hence in vitro test should be

obtained.