

Penapisan Virtual Senyawa Bahan Alam Indonesia dari Pangkalan Data Herbal DB sebagai Kandidat Inhibitor Matrix Metalloproteinase-9 pada Kanker Kolorektal = Virtual Screening of Indonesian Natural Ingredients from HerbalDB Database as Candidates for Matrix Metalloproteinase-9 Inhibitors in Colorectal Cancer

Audrew Johnson Budianto, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920519234&lokasi=lokal>

Abstrak

Kanker kolorektal adalah kanker yang terletak pada rektum atau kolon dengan sel-sel yang berkembang dengan tidak terkendali. Obat kanker untuk kanker kolorektal memiliki beberapa kelemahan seperti kurangnya spesifitas dan dapat terjadinya resistensi, sehingga perlu dikembangkan terapi target untuk mengurangi kelemahan tersebut. Berbagai penelitian dilakukan untuk merancang obat yang dapat mentarget protein yang berkaitan dengan perkembangan kanker kolorektal, salah satunya adalah Matrix Metalloproteinase-9. Penghambatan dari protein tersebut memungkinkan untuk menghambat penyebaran kanker, sehingga pencarian senyawa penghambat Matrix Metalloproteinase-9 menarik untuk dilakukan. Penelitian dapat dilakukan dengan memanfaatkan metode penapisan virtual. Tujuan dari penelitian ini adalah mendapatkan 10 senyawa kandidat dengan potensi menjadi inhibitor Matrix Metalloproteinase-9. Penapisan virtual dapat digunakan untuk melakukan pencarian senyawa kandidat inhibitor dari basis data HerbalDB. Berdasarkan hasil penapisan didapatkan 10 peringkat senyawa terbaik berdasarkan energi ikatan bebas dan pose pengikatan yaitu Cassiamin C (-11,1 kkal/mol), Sikloartokarpesin (-10,9 kkal/mol), Prunin 6''-p-kumarat (-10,9 kkal/mol), Isookaninrhamnosida (-10,5 kkal/mol), 5,7,3',4'-tetrahidroksiflavanon 7-alfa-l-arabinofuranosil-(1-6)-glukosida (-10,3 kkal/mol), Kuwanon T (-10,3 kkal/mol), Boesenbergin B (-10,2 kkal/mol), Sianidin 3-arabinosida (-10,2 kkal/mol), Morusin (-10,2 kkal/mol), dan Dehidropiperonalin (-10,1 kkal/mol). Hasil tersebut menunjukkan senyawa memiliki potensi untuk menghambat Matrix Metalloproteinase-9

.....Colorectal Cancer is located on the colon or the rectum of the patient with uncontrolled cell growth. Cancer drugs for colorectal cancer have several weaknesses such as lack of specificity, so it is necessary to develop targeted therapies to reduce these weaknesses. Various research were done to design a drug with purpose of targeting the protein in which is related to the growth of colorectal cancer, one of them being Matrix Metalloproteinase-9. Inhibition of Matrix Metalloproteinase-9 possibly inhibits the spread of colorectal cancer, therefore a research to find candidates is appealing. Research can be done by using the virtual screening method. The purpose of this study is to obtain 10 candidate compounds with the potential to inhibit Matrix Metalloproteinase-9. Virtual screening method is used to search for candidate compounds from HerbalDB database. Based on the screening results, the best compound rankings based on the free bond energy and binding pose were obtained, namely Cassiamin C (-11,1 kkal/mol), Cycloartocarpesin (-10,9 kkal/mol), Prunin 6''-p-coumarate (-10,9 kkal/mol), Isookaninrhamnoside (-10,5 kkal/mol), 5,7,3',4'-tetrahydroxyflavanone 7-alpha-l-arabinofuranosyl-(1-6)-glucoside (-10,3 kkal/mol), Kuwanon T (-10,3 kkal/mol), Boesenbergin B (-10,2 kkal/mol), Cyanidin 3-arabinoside (-10,2 kkal/mol), Morusin (-10,2 kkal/mol), dan Dehydropiperonaline (-10,1 kkal/mol). The results indicate potential candidates to inhibit Matrix Metalloproteinase-9.