

Analisis in silico mekanisme antikanker payudara dari senyawa bioaktif teripang sea cucumber menggunakan autodock dan vina = In silico analysis of sea cucumber bioactive compounds mechanism as anti breast cancer activity using autodock and vina / Zeta Tamimi

Zeta Tamimi, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20387320&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Akhir-akhir ini, perhatian telah diberikan untuk meneliti bahan alam laut yang berpotensi sebagai antikanker khususnya untuk kanker payudara, yaitu teripang atau sea cucumber. Triterpen glikosida merupakan senyawa bioaktif yang menunjukkan aktivitas antikanker atau aktivitas sitotoksik yang jumlahnya paling banyak terkandung dalam Teripang, seperti frondoside A, okhotosid B1-B3, intercedenside A-C, holothurin A, dan 24-dehidroechinoside. Pada penelitian ini, dilakukan penambatan molekul pada senyawa bioaktif teripang terhadap target reseptor ER- α , FGFR1, VEGFR2, PR, dan IGF-1R yang berperan dalam penyakit kanker payudara untuk diamati interaksi yang situs aktifnya mempunyai potensial sebagai antikanker payudara. Dari hasil penambatan hanya ER- α dan IGF-1R yang menunjukkan hasil energi bebas ikatan paling rendah dengan menggunakan parameter Vina. Dari hasil penambatan dan visualisasi interaksi senyawa bioaktif teripang dengan ER- α , senyawa 24-dehidroechinoside, holothurin A, intercedenside A, intercedenside B, okhotoside B1, dan okhotoside B2 memiliki kemiripan posing dengan kontrol positif (inhibitor). Adapun pada IGF-1R hanya senyawa 24-dehidroechinoside yang ditemukan memiliki kemiripan posing dengan kontrol positif.

ABSTRAK

Recently, attention has been given to examine the potential of marine natural products as anticancer, especially for breast cancer, which is Teripang or sea cucumber. Triterpene glycosides are bioactive compounds mostly found in sea cucumber that show anticancer activity or cytotoxic activity, such as frondoside A, okhotosides B1-B3, intercedensides A-C, holothurin A, and 24-dehydroechinoside. Molecular docking of sea cucumber bioactive compounds was conducted towards five receptor target which have role in breast cancer, such as estrogen receptor alpha, fibroblast growth factor receptor 1 (FGFR1), vascular endothelial growth factor receptor 2 (VEGFR2), progesterone receptor (PR), insulin-like growth factor 1 receptor (IGFR1) to observed the interaction which active site has the potential as anti-breast cancer. The results shows that ER- α and IGF-1R gives the lowest binding energy by using Vina parameter. Compounds that showed similar posing of positive control (inhibitor) in ER- α are 24-dehydroechinoside, holothurin A, intercedenside A, intercedenside B, okhotoside B1, and okhotoside B2. While in IGF-1R, 24-dehydroechinoside is the only compound who showed similar posing to the positive control.