

Pembuatan pangkalan data senyawa kimia dari fungi laut dan penapisannya sebagai inhibitor multitarget pada kanker paru jenis karsinoma bukan sel kecil = Database compilation of chemical compounds from marine fungi and its virtual screening as multitarget inhibitor of non small cell lung cancer / Mega Watty

Mega Watty

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20430903&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Kanker paru-paru merupakan salah satu jenis kanker yang paling banyak diderita, terutama di negara dengan jumlah perokok dan tingkat polusi yang tinggi seperti Indonesia. Dalam beberapa tahun belakangan, perkembangan obat kanker paru jenis karsinoma bukan sel kecil diarahkan pada pengobatan multitarget karena pada pengobatan target tunggal sering kali proliferasi sel tumor dapat diaktifkan kembali melalui jalur yang lain seperti angiogenesis. Eksplorasi senyawa bioaktif dari bahan laut, termasuk fungi laut, telah mendapat perhatian khusus akhir-akhir ini sebagai pengobatan antikanker. Pada penelitian ini dilakukan pembuatan pangkalan data dan penapisan secara in silico untuk memperoleh senyawa aktif fungi laut yang berpotensi sebagai inhibitor EGFR-TK dan VEGFR2 kinase, yang masing-masing berperan sebagai agen antiproliferatif dan antiangiogenesis, menggunakan AutoDock dan Vina. Berdasarkan hasil penapisan, didapatkan tiga senyawa aktif sebagai inhibitor EGFR-TK (FU0015, FU0051, dan FU0202), satu senyawa aktif sebagai inhibitor VEGFR-2 kinase (FU0033), serta 17 senyawa potensi inhibitor multitarget (FU0018, FU0019, FU0028, FU0034, FU0037, FU0038, FU0029, FU0043, FU0079, FU0105, FU0127, FU0155, FU0156, FU0158, FU0248, FU0254, FU0261). Seluruh senyawa aktif tersebut berasal dari filum Ascomycota sehingga diharapkan dapat dilakukan eksplorasi lebih lanjut fungi laut dari filum Ascomycota.

ABSTRACT

Lung cancer is one of the most common type of cancer, especially in countries with high numbers of smokers and high levels of pollution such as Indonesia. In the past few years, drug development of non-small cell lung cancer has been directed to a multitarget treatment as oftentimes on a single-targeted treatment proliferation of tumor cells can be reactivated via other pathways such as angiogenesis. Exploration of bioactive compounds from marine materials, including marine fungi, for anticancer treatment has become a major concern lately. In this research, database was created and in silico screening was conducted to obtain potential marine fungi active compounds as EGFR-TK and VEGFR2 kinase inhibitor, for each act as antiproliferative and antiangiogenesis agents, by using AutoDock and Vina. Based on these screening results have been identified three active compounds as the inhibitor of EGFR-TK (FU0015, FU0051, and FU0202), one active compound as the inhibitor of VEGFR-2 kinase (FU0033), and 17 compounds that potentially become a multitarget inhibitor (FU0018, FU0019, FU0028, FU0034, FU0037, FU0038, FU0029, FU0043, FU0079, FU0105, FU0127, FU0155, FU0156, FU0158, FU0248, FU0254, FU0261). All of these active compounds are from Ascomycota phylum so that further marine fungi exploration can be conducted from Ascomycota phylum.