

# Interaksi Beberapa Senyawa Flavonoid dengan Protein Apoptosis pada Sel Kanker Kolorektal HT-29: Uji In Silico dan In Vitro = Interaction of Flavonoid Compounds With Apoptotic Proteins in HT-29 Colorectal Cancer Cells: In Silico and In Vitro study

Feby Lilia Rosa, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920518898&lokasi=lokal>

---

## Abstrak

Kanker kolorektal merupakan masalah kesehatan masyarakat global dengan prevalensi tinggi yang pengobatannya masih memiliki keterbatasan. Senyawa flavonoid terutama kuersetin dinilai memiliki aktivitas biologis sebagai antikanker, sehingga beberapa senyawa flavonoid lainnya diharapkan juga memiliki aktivitas serupa. Tujuan dari studi ini adalah melakukan analisis secara in-silico dan in-vitro terhadap beberapa senyawa flavonoid terutama kuersetin dan turunannya sebagai agen apoptosis sel kanker kolorektal HT-29. Metode yang dilakukan secara in-silico meliputi jejaring farmakologi dan simulasi molekuler. Senyawa terbaik berdasarkan analisis in-silico diuji secara in-vitro dengan menilai aktivitas sitotoksitasnya pada sel HT-29 menggunakan metode MTT Assay dan apoptosisnya dianalisis menggunakan flow cytometry. Protein target yang memiliki interaksi dengan kuersetin dan senyawa turunannya yaitu AKT1, APAF1, BCL2, CASP3, MAPK1 dan CASP9. Berdasarkan analisis prediksi ADMET, kuersetin dan turunannya masuk dalam kategori aman sebagai kandidat obat. Dua senyawa terbaik berdasarkan analisis in-silico yakni isoramnetin dan isokuersitrin dipilih untuk diuji secara in-vitro. Aktivitas sitotoksik kuersetin, isoramnetin dan isokuersitrin terhadap sel HT-29 dinyatakan dengan nilai CC50 berturut-turut 158,92mm + 5,4, 65,52mm + 5,0 dan 47,59mm + 2,5. Aktivitas apoptosis mencapai 16,7% hingga 62,4% jika dibandingkan dengan kontrol sel. Isoramnetin dan Isokuersitrin sebagai senyawa flavonoid turunan kuersetin berpotensi sebagai agen apoptosis sel kanker kolorektal HT-29. Kanker kolorektal merupakan masalah kesehatan masyarakat global dengan prevalensi tinggi yang pengobatannya masih memiliki keterbatasan. Senyawa flavonoid terutama kuersetin dinilai memiliki aktivitas biologis sebagai antikanker, sehingga beberapa senyawa flavonoid lainnya diharapkan juga memiliki aktivitas serupa. Tujuan dari studi ini adalah melakukan analisis secara in-silico dan in-vitro terhadap beberapa senyawa flavonoid terutama kuersetin dan turunannya sebagai agen apoptosis sel kanker kolorektal HT-29. Metode yang dilakukan secara in-silico meliputi jejaring farmakologi dan simulasi molekuler. Senyawa terbaik berdasarkan analisis in-silico diuji secara in-vitro dengan menilai aktivitas sitotoksitasnya pada sel HT-29 menggunakan metode MTT Assay dan apoptosisnya dianalisis menggunakan flow cytometry. Protein target yang memiliki interaksi dengan kuersetin dan senyawa turunannya yaitu AKT1, APAF1, BCL2, CASP3, MAPK1 dan CASP9. Berdasarkan analisis prediksi ADMET, kuersetin dan turunannya masuk dalam kategori aman sebagai kandidat obat. Dua senyawa terbaik berdasarkan analisis in-silico yakni isoramnetin dan isokuersitrin dipilih untuk diuji secara in-vitro. Aktivitas sitotoksik kuersetin, isoramnetin dan isokuersitrin terhadap sel HT-29 dinyatakan dengan nilai CC50 berturut-turut 158,92mm + 5,4, 65,52mm + 5,0 dan 47,59mm + 2,5. Aktivitas apoptosis mencapai 16,7% hingga 62,4% jika dibandingkan dengan kontrol sel. Isoramnetin dan Isokuersitrin sebagai senyawa flavonoid turunan kuersetin berpotensi sebagai agen apoptosis sel kanker kolorektal HT-29.

.....Colorectal cancer is a global public health problem with a high prevalence, and its treatment still has

limitations. Flavonoid compounds, especially quercetin, are considered to have biological activity as an anticancer, so several other flavonoid compounds are also expected to have similar activity. This study aimed to perform in-silico and in-vitro analysis of several flavonoid compounds, especially quercetin and its derivatives as apoptotic agents for colorectal cancer cells HT-29. The in silico method includes network pharmacology and molecular simulations. The best compounds based on in silico analysis were tested in-vitro by assessing their cytotoxic activity in HT-29 cells using the MTT Assay method. Their apoptosis was analyzed using flow cytometry. Target proteins interacting with quercetin and its derivatives are AKT1, APAF1, BCL2, CASP3, MAPK1 and CASP9. Based on ADMET prediction analysis, quercetin and its derivatives are included in the safe category as drug candidates. The best compounds based on in-silico analysis, isorhamnetin and isoquercitrin, were selected to be tested in-vitro. The cytotoxic activity of quercetin, isorhamnetin and isoquercitrin against HT-29 cells was expressed by CC50 values of 158.92  $\mu\text{M}$   $\pm$  5.4, 65.52  $\mu\text{M}$   $\pm$  5.0 and 47.59  $\mu\text{M}$   $\pm$  2.5, respectively. Apoptotic activity reached 16.7% to 62.4% when compared to control cells. Isoramnetin and isoquercitrin, flavonoid compounds derived from quercetin, have potential apoptotic agents for HT-29 colorectal cancer cells.