

Penambatan Molekuler Interaksi Senyawa Flavonoid Dalam Tanaman *Glycyrrhiza glabra* Terhadap Protein Target EGFR Sebagai Kandidat Obat Kanker Mulut = Molecular Docking Analysis of Flavonoid Compounds from *Glycyrrhiza glabra* on the EGFR Protein Target as a Candidate for Oral Cancer Drug

Samantha Ruth Andriawan, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920537090&lokasi=lokal>

Abstrak

Pendahuluan: Dalam pembentukan kanker mulut, ada banyak faktor yang memiliki peran besar, salah satunya protein epidermal growth factor receptor atau EGFR. EGFR merupakan gen yang sangat polimorfik dan rentan terhadap mutasi. Mutasi ini menyebabkan reseptor EGFR yang lebih aktif dan sensitif terhadap ligan EGF (epidermal growth factor) sehingga menyebabkan aktivitas persinyalan EGFR yang terus meningkat, proliferasi sel kanker yang tidak terkendali, resistensi terhadap apoptosis, hingga terjadi proses angiogenesis. Indonesia memiliki keanekaragaman hayati yang melimpah, salah satunya adalah tanaman akar manis atau disebut juga *Glycyrrhiza glabra*. Pada tanaman ini, terdapat delapan jenis flavonoid yang memiliki potensi antikanker yang besar, yaitu isoliquiritigenin, glyzaglabrin, prunetin, shinpterocarpin, licochalcone A, glabridin, glisoflavone, dan isoangustone A. Kedelapan senyawa flavonoid ini berpotensi untuk berikatan dengan reseptor EGFR serta berkompetisi dengan ligan EGF untuk menghasilkan efek antikanker. **Tujuan:** Mengingat mayoritas penduduk Indonesia yang tinggal jauh dari perkotaan, tanaman ini dapat menjadi salah satu tanaman yang berpotensi untuk pengobatan kanker mulut. Oleh karena itu, penelitian ini diharapkan bisa menggali potensi yang dimiliki oleh *Glycyrrhiza glabra* sebagai kandidat obat kanker mulut. **Metode:** Studi *in silico* melalui penambatan molekuler dengan program AutoDockTools v.1.5.6 digunakan untuk menguji potensi kedelapan senyawa flavonoid yang terkandung dalam *Glycyrrhiza glabra* untuk berikatan dengan protein target EGFR. **Hasil:** Penambatan molekuler kedelapan senyawa flavonoid menunjukkan bahwa seluruh senyawa yang diuji memiliki ikatan yang sangat stabil karena lebih rendah dari -7 kcal/mol. Selain itu, stabilitas dari interaksi ini juga diperkuat oleh keberadaan ikatan Van der Waals, ikatan hidrogen, serta ikatan hidrofobik. **Kesimpulan:** Dari kedelapan senyawa yang diuji, dapat disimpulkan bahwa senyawa yang memiliki afinitas ikatan terbaik dengan protein EGFR adalah senyawa glabridin, dengan nilai $G = -10.53$ kcal/mol dan $K_i = 19.23$ nM.

.....**Introduction:** In the formation of oral cancer, there are many factors that play a significant role, one of which is the epidermal growth factor receptor protein, or EGFR. EGFR is a highly polymorphic gene and is susceptible to mutations. These mutations lead to a more active EGFR receptor that is sensitive to the EGF (epidermal growth factor) ligand, resulting in increased EGFR signaling activity, uncontrolled proliferation of cancer cells, resistance to apoptosis, and the occurrence of angiogenesis. Indonesia is rich in biodiversity, including the licorice plant, also known as *Glycyrrhiza glabra*. This plant contains eight types of flavonoids with significant anticancer potential, namely isoliquiritigenin, glyzaglabrin, prunetin, shinpterocarpin, licochalcone A, glabridin, glisoflavone, and isoangustone A. These eight flavonoid compounds have the potential to bind to the EGFR receptor and compete with the EGF ligand to produce anticancer effects. **Objective:** Given that the majority of Indonesia's population resides far from urban areas, this plant has the potential to be used in the treatment of oral cancer. Therefore, this research aims to explore the potential of

Glycyrrhiza glabra as a candidate for oral cancer treatment. Method: In silico studies using molecular docking with AutoDockTools v.1.5.6 were conducted to test the potential of the eight flavonoid compounds found in Glycyrrhiza glabra to bind to the target protein EGFR. Results: Molecular docking of the eight flavonoid compounds showed that all the tested compounds had highly stable bindings, with binding energies lower than -7 kcal/mol. Additionally, the stability of these interactions was reinforced by the presence of van der Waals forces, hydrogen bonds, and hydrophobic interactions. Conclusion: From the eight compounds tested, it can be concluded that the compound with the best binding affinity to the EGFR protein is glabridin, with a G value of -10.53 kcal/mol and a Ki value of 19.23 nM.