

**INTERAKSI DAN DESAIN PIGMEN *MONASCUS SP.* SEBAGAI
KANDIDAT OBAT ANTIKANKER SERVIK**

SKRIPSI

Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana
pada Program Studi S-1 Farmasi Universitas Bakti Tunas Husada



**CINDI KARTIKA
31118005**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
OKTOBER 2022**

ABSTRAK

Interaksi dan Desain Pigmen *Monascus sp.* sebagai Kandidat Obat Antikanker Serviks

Cindi Kartika

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Sampai saat ini obat untuk mengatasi penyakit kanker terutama kanker servik masih sangat terbatas. Penelitian ini bertujuan untuk mengusulkan pigmen *Monascus sp.* sebagai antikanker servik melalui metode *molecular docking* dan *dynamics*. Sampel pigmen *monascus* struktur 3D hasil gambar dan optimasi di *Gaussian 09W* dengan reseptor *Estrogen Alfa (3ERT)*, *Estrogen Beta (4Z11)* dan *EGFR (3W2S)* dari *PDB* di *docking* menggunakan *AutodockTools* kemudian divalidasi dengan melakukan *Molecular Dynamic*. Hasilnya kemudian divisualisasi dengan *Pymol*, dianalisis efektivitas program *docking* dan program *dynamic* dengan plot *Ramachandran*. Hasil *docking* terdapat 2 pigmen yang memiliki ΔG lebih rendah dari raloxifen dengan reseptor estrogen beta dengan ΔG terendah ditunjukkan oleh pigmen *Monascin* dan *ankaflavin* berturut yaitu -6.94 kkal/mol dengan nilai K_i 39.49 nM dan -6.22 kkal/mol dengan nilai K_i 27.78 nM. Hasil *molecular dynamics*, *Ankaflavin* dan *Monascin* memiliki kestabilan yang baik, karena daerah *outlier* memiliki nilai kurang dari 15%, yaitu 11.722% dan 10.256%. Dan residu asam amino pada *most favoured region* lebih besar dari 50% yaitu 68.864% dan 70.330%. Selain itu, pigmen *Monascopyridine B* dan *Monascuspiloin* menunjukkan hasil yang baik dan stabil pada reseptor EGFR (3W2S) karena daerah *outlier* sebesar 14.692% dan 10.623%. Dan residu asam amino pada *most favoured region* sebesar 65.403% dan 73.260%. Dapat disimpulkan bahwa pigmen *Ankaflavin*, *Monascin*, *Monascopyridine B* dan *Monascuspiloin* dapat digunakan sebagai kandidat antikanker servik baru.

Kata Kunci : *Monascus*, kanker servik, *docking*, *molecular dynamics*

ABSTRACT

The Interaction and Design of *Monascus sp.* Pigment as Candidate Cervical Cancer Drug.

Cindi Kartika

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstract

Until now, drugs to treat diseases, especially cervical cancer, are still very limited. This study aims to propose the *Monascus sp.* as cervical anticancer through molecular docking and dynamics methods. *Monascus* pigment sample with 3D structure image and optimization in Gaussian 09W with Estrogen Alpha (3ERT), Estrogen Beta (4ZI1) and EGFR (3W2S) receptors from PDB docked using AutodockTools and then validated by performing Molecular Dynamic. The results were then visualized with Pymol, analyzed the effectiveness of the docking program and dynamic program using the Ramachandran plot. The docking results show that there are 2 pigments that have lower G than raloxifen with estrogen receptor beta with the lowest G indicated by the pigment Monascin and ankaflavin, respectively, namely -6.94 kcal/mol with a Ki value of 39.49 nM and -6.22 kcal/mol with a Ki value of 27.78 nM. . The results of molecular dynamics, Ankaflavin and Monascin have good stability, because the outlier area has a value of less than 15%, namely 11.722% and 10.256%. And the amino acid residues in the most preferred area were greater than 50%, namely 68.864% and 70.330%. In addition, Monascopyridine B and Monascuspiloin pigments showed good and stable results at the EGFR (3W2S) receptor because the outlier areas were 14.692% and 10.623%, respectively. And the amino acid residues in the most-favored region were 65.403% and 73.260%, respectively. It can be said that the pigments Ankaflavin, Monascin, Monascopyridine B and Monascuspiloin can be used as new cervical anticancer candidates.

Key word : Monascus, Cervical cancer, docking, molecular dynamics