

MUHAMMAD NOERZAMZAM

***VIRTUALSCREENING* SENYAWA TURUNAN KALKON
SEBAGAI ANTIKANKER PARU-PARU MENGGUNAKAN
METODE PENAMBATAN MOLEKUL**



**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS GARUT
2017**

**VIRTUALSCREENING SENYAWA TURUNAN KALKON
SEBAGAI ANTIKANKER PARU-PARU MENGGUNAKAN
METODE PENAMBATAN MOLEKUL**

TUGAS AKHIR

Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi pada program Studi S1 Farmasi Jurusan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Garut

Garut, Oktober 2017

Oleh:

**Muhammad Noerzamzam
2404113078**

Disetujui Oleh:

Riska Prasetiawati, M.Si., Apt.
Pembimbing Utama

Ruchiyat, M.Pd.
Pembimbing Serta

LEMBAR PENGESAHAN



**JURUSAN FARMASI
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS GARUT**

DEKAN

dr. Siva Hamdani, MARS.

DEKLARASI

Dengan ini menyatakan bahwa buku tugas akhir dengan judul “**VIRTUAL SCREENING SENYAWA TURUNAN KALKON SEBAGAI ANTIKANKER PARU-PARU MENGGUNAKAN METODE PENAMBATAN MOLEKUL**” ini beserta seluruh isinya adalah benar-benar karya saya sendiri, dan saya tidak melakukan penjiplakan atau pengutipan dengan cara-cara yang tidak sesuai dengan etika keilmuan yang ada dalam masyarakat keilmuan. Atas pernyataan ini, saya siap menanggung resiko/sanksi yang dijatuhkan kepada saya apabila kemudian ditemukan adanya pelanggaran terhadap etika keilmuan dalam karya ini, atau ada klaim dari pihak lain terhadap keaslian karya saya ini.

Garut, Oktober 2017

Yang membuat pernyataan
Tertanda

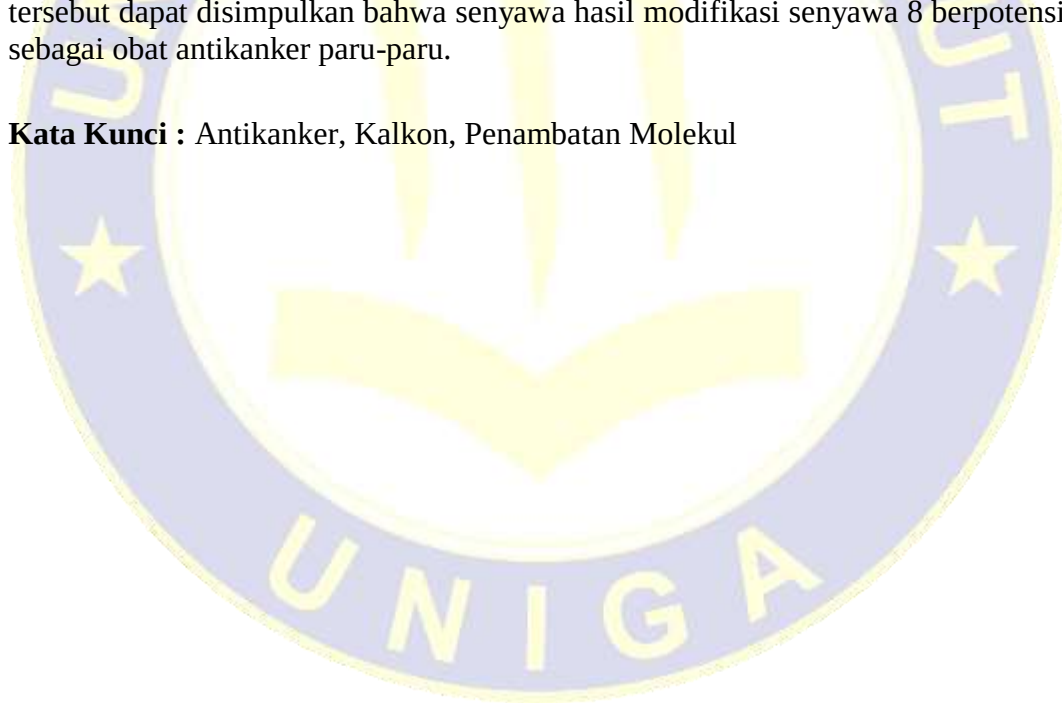
Muhammad Noerzamzam

**VIRTUAL SCREENING SENYAWA TURUNAN KALKON
SEBAGAI ANTIKANKER PARU-PARU
MENGUNAKAN METODE PENAMBATAN MOLEKUL**

ABSTRAK

Telah dilakukan penambatan molekul senyawa-senyawa turunan kalkon sebagai antikanker paru-paru secara komputasi menggunakan beberapa program. Penggambaran struktur senyawa menggunakan MarvinSketch[®], kemudian visualisasi dan preparasi senyawa dilakukan menggunakan Discovery Studio 2016[®]. Senyawa turunan kalkon yang diperoleh kemudian ditambatkan pada sisi aktif reseptor menggunakan program Autodock4[®]. Kemudian data yang didapatkan berupa ΔG (Jumlah energi bebas) yang menunjukkan kestabilan interaksi (ikatan) *ligand* dengan reseptor antikanker paru-paru (5UG8) pada sisi aktifnya. Dari hasil penambatan molekul diperoleh nilai energi bebas atau ΔG yang paling rendah pada senyawa 8 dengan nilai -8.52, berikatan dengan residu asam amino target yaitu MET 793A, selain itu senyawa 8 memenuhi aturan Lima Lipinski. Dari hasil tersebut dapat disimpulkan bahwa senyawa hasil modifikasi senyawa 8 berpotensi sebagai obat antikanker paru-paru.

Kata Kunci : Antikanker, Kalkon, Penambatan Molekul

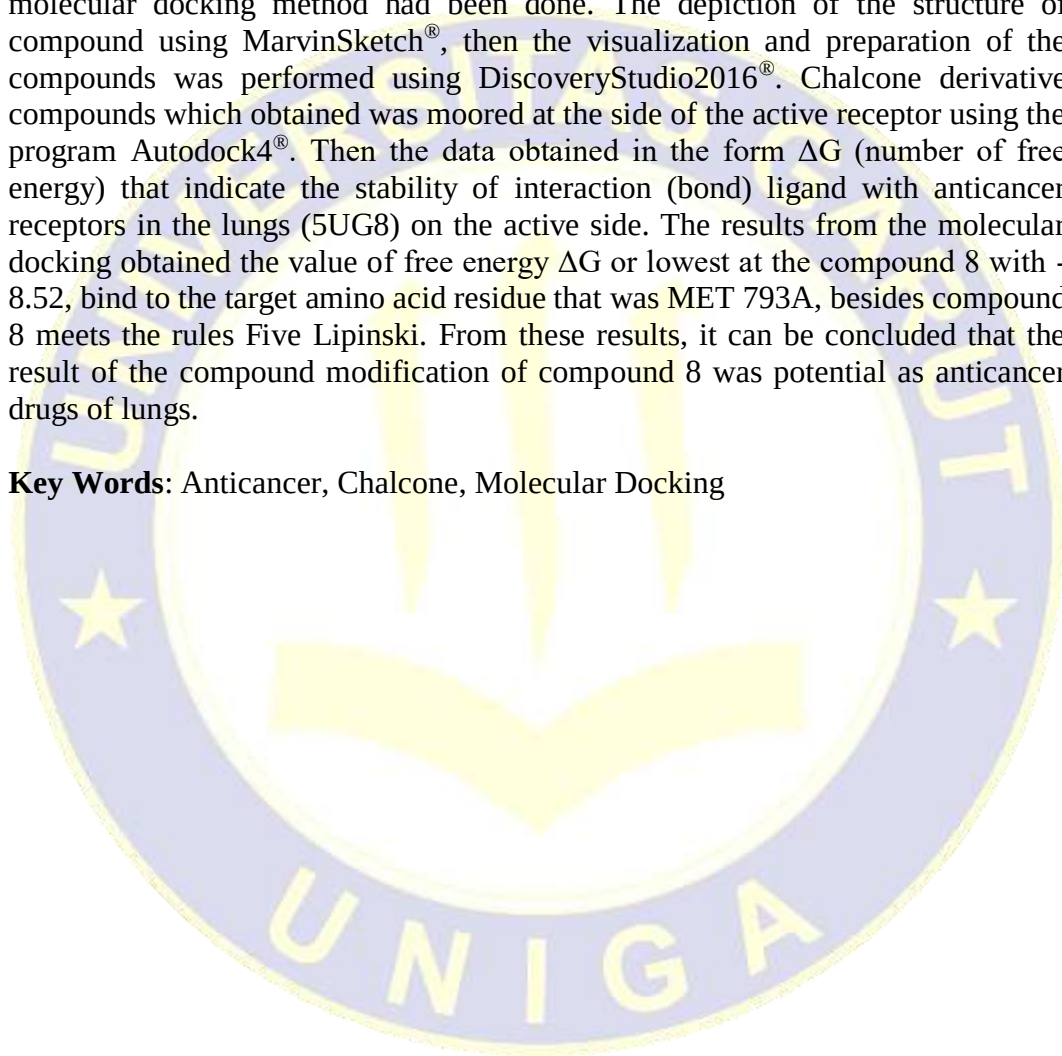


VIRTUAL SCREENING OF CHALCONE DERIVATIVE COMPOUNDS AS ANTICANCER LUNGS USING MOLECULAR DOCKING METHOD

ABSTRACT

The virtual screening of chalcone derivative compounds as anticancer lungs using molecular docking method had been done. The depiction of the structure of compound using MarvinSketch[®], then the visualization and preparation of the compounds was performed using DiscoveryStudio2016[®]. Chalcone derivative compounds which obtained was moored at the side of the active receptor using the program Autodock4[®]. Then the data obtained in the form ΔG (number of free energy) that indicate the stability of interaction (bond) ligand with anticancer receptors in the lungs (5UG8) on the active side. The results from the molecular docking obtained the value of free energy ΔG or lowest at the compound 8 with -8.52, bind to the target amino acid residue that was MET 793A, besides compound 8 meets the rules Five Lipinski. From these results, it can be concluded that the result of the compound modification of compound 8 was potential as anticancer drugs of lungs.

Key Words: Anticancer, Chalcone, Molecular Docking



KATA PENGANTAR

Segala puji dan syukur penulis panjatkan kehadirat Allah SWT yang telah melimpahkan hikmat, berkat, rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan Tugas Akhir yang berjudul “**VIRTUAL SCREENING SENYAWA TURUNAN KALKON SEBAGAI OBAT ANTIKANKER PARU-PARU DENGAN METODE PENAMBATAN MOLEKUL**” dapat diselesaikan. Tugas Akhir ini merupakan salah satu syarat untuk menyelesaikan pendidikan sarjana S1 di Jurusan Farmasi Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Garut.

Dalam proses pendalaman materi ini, tentunya kami mendapatkan bimbingan, arahan, koreksi dan saran, untuk itu kami menyampaikan rasa terima kasih yang setulusnya kepada:

1. dr. Siva Hamdani, MARS., selaku Dekan Jurusan Farmasi Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Garut.
2. Riska Prasetiawati, M.Si., Apt. selaku dosen pembimbing utama dan Ruchiyat, M.Pd. selaku pembimbing serta, atas bimbingan dan perhatiannya serta selalu memberikan pencerahan kepada penulis sehingga Tugas Akhir ini dapat diselesaikan dengan baik.
3. Keluarga, yang selalu memberikan doa dan dukungan moril maupun materil.
4. Rekan-rekan mahasiswa seangkatan yang selalu memberikan dorongan sehingga penulis dapat menyelesaikan penelitian ini.

5. Sahabat-sahabatku khususnya Diestyani Supratman, Euis Hermawati, Fitriani Wulandari, Gina Apriantina, dan Wina Winarti yang selalu memotivasi dan menyemangati penulis dalam melaksanakan pembuatan Tugas Akhir ini.
6. Teman seperjuangan Tugas Akhir khususnya Eneng Mikania Lestari yang selalu memberikan motivasi dan semangat kepada penulis dalam menyelesaikan Tugas Akhir ini.

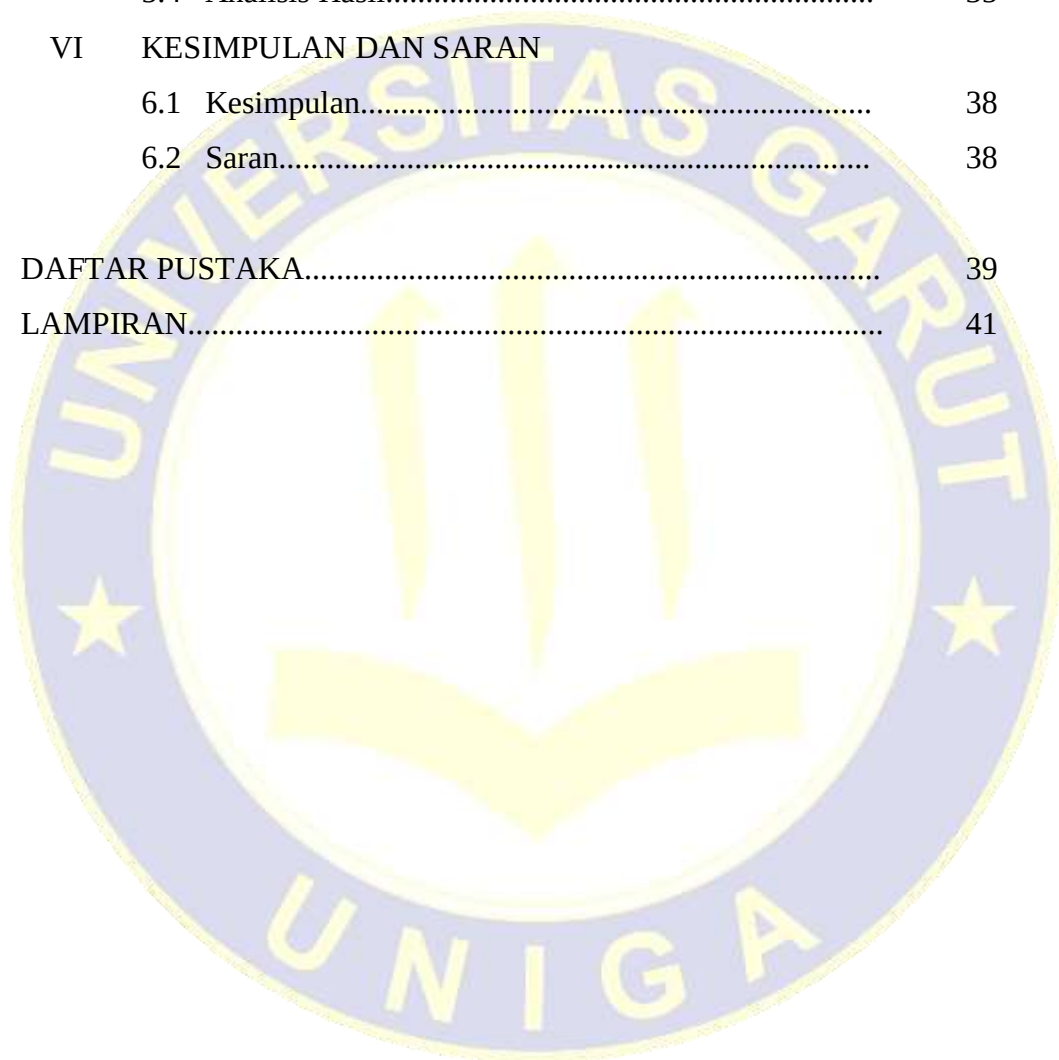
Penulis menyadari penyusunan Tugas Akhir ini masih banyak kekurangan dalam penyusunannya sehingga kritik dan saran yang membangun sangat diharapkan oleh penulis. Akhir kata, semoga Tugas Akhir ini dapat bermanfaat bagi kita semua di masa sekarang maupun di masa mendatang.



DAFTAR ISI

	Halaman
KATA PENGANTAR.....	i
DAFTAR ISI.....	iii
DAFTAR LAMPIRAN.....	v
DAFTAR TABEL.....	vi
DAFTAR GAMBAR.....	vii
PENDAHULUAN.....	1
BAB	
I TINJAUAN PUSTAKA	
1.1 Deskripsi Penyakit.....	3
1.2 <i>Epidermal Growth Factoe Reseptor (EGFR)</i>	13
1.3 Kalkon.....	16
1.4 Protein dan Asam Amino.....	17
1.5 Interaksi Ikatan.....	22
1.6 Penambatan Molekul.....	23
1.7 Protein Data Bank.....	26
1.8 Discovery Studio Visualizer.....	26
1.9 Marvin Sketch.....	26
1.10 Autodock.....	27
II METODE PENELITIAN	28
III ALAT DAN BAHAN	
3.1 Alat.....	29
3.2 Bahan.....	29
IV PENELITIAN DAN HASIL PENELITIAN	
4.1 Preparasi Protein.....	30
4.2 Preparasi Ligan.....	30
4.3 Validasi Metode.....	31

4.4	Penambatan Molekul.....	31
4.5	Analisis dan Visualisasi Hasil Penambatan.....	33
V	PEMBAHASAN	
5.1	Modifikasi Senyawa.....	34
5.2	Validasi Metode.....	34
5.3	Penambatan Molekul.....	34
5.4	Analisis Hasil.....	35
VI	KESIMPULAN DAN SARAN	
6.1	Kesimpulan.....	38
6.2	Saran.....	38
	DAFTAR PUSTAKA.....	39
	LAMPIRAN.....	41



DAFTAR LAMPIRAN

LAMPIRAN		Halaman
1	ALUR PENELITIAN.....	41
2	STRUKTUR 3D EGFR.....	42
3	HASIL MODIFIKASI STRUKTUR.....	43
4	HASIL VALIDASI METODE.....	44
5	HASIL PENAMBATAN MOLEKUL.....	44
6	ANALISIS STRUKTUR.....	45
7	ANALISIS STRUKTUR 3D (LANJUTAN).....	46

DAFTAR TABEL

Tabel		Halaman
IV.1	Hasil Validasi Metode.....	44
IV.2	Hasil Penambatan Molekul.....	44



DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
I.1 Struktur erlotinib.....	13
I.2 Mekanisme kerja EGFR.....	15
I.3 Struktur kalkon.....	17
I.4 Asam amino alifatik.....	18
I.5 Asam amino yang mengandung gugus hidroksi	18
I.6 Asam amino yang mengandung atom sulfur.....	19
I.7 Asam amino yang mengandung gugus asam atau amidanya.....	19
I.8 Asam amino yang mengandung gugus basa.....	20
I.9 Asam amino aromatik.....	20
I.10 Asam imino.....	21
I.11 Konsep dasar penambatan molekuler.....	24
IV.1 Alur Penelitian.....	41
IV.2 Struktur 3D reseptor.....	42
IV.3 Hasil modifikasi senyawa kalkon.....	43
IV.4 Analisis visualisasi hasil.....	45
IV.4 Analisis visualisasi hasil 3D (Lanjutan).....	46