

AKTIVITAS SENYAWA ALKALOID SA2014 DARI SPONS
LAUT *Cinachyrella anomala* TERHADAP PROTEIN p53
KANKER PAYUDARA T47D MENGGUNAKAN DOCKING
MOLEKULER

Nama Mahasiswa : Fitri Lianingsih
NRP : 1512 100 011
Jurusan : Biologi FMIPA
Dosen Pembimbing : Dr. Awik Puji Dyah Nurhayati,
M.Si

ABSTRAK

p53 merupakan protein yang menginduksi terjadinya apoptosis ketika terjadi kerusakan DNA. Protein *p53* yang mengalami mutasi terlibat pada lebih dari 50% pada kanker manusia dan berperan pada pembentukan kanker payudara. Riset untuk mendapatkan kandidat potensial obat antikanker yang sedikit menimbulkan efek samping umumnya diperoleh dari alam, salah satunya adalah spons laut. Tujuan penelitian ini adalah mengetahui skor docking dan asam amino yang berperan dalam aktivitas senyawa alkaloid SA2014 terhadap protein *p53*.

Penelitian ini menggunakan metode docking molekuler pada software PLANTS (Protein Ligand Ant System), preparasi protein menggunakan YASARA, preparasi ligan menggunakan MarvinSketch, validasi skor docking menggunakan Root Mean Square Deviation (RMSD) dan visualisasi menggunakan YASARA dan VMD (Visual Molecular Dynamic). Analisa data menggunakan skor docking dan jenis asam amino pada ikatan antara ligan dan protein target. Skor docking molekuler selanjutnya dibandingkan dengan doxorubicin yang berinteraksi dengan *p53* pada kanker payudara T47D. Hasil penelitian menyatakan bahwa ligan SA2014 memiliki skor docking -52.0493 sedangkan doxorubicin -50.6343. Jenis asam amino yang dekat dengan interaksi antara senyawa alkaloid SA2014 dan protein *p53* adalah leusin dan fenilalanin. Senyawa SA2014 memiliki kemampuan sebagai

senyawa antikanker melawan kanker payudara T47D melalui interaksi asam amino leusin dan fenilalanin. Leusin berperan pada ikatan p53 dengan senyawa alkaloid SA2014 yang akan mempengaruhi ketahanan siklus sel pada fase G1/S dan memicu apoptosis. Fenilalanin berada pada interface interaksi p53 dan penting untuk menstabilkan struktur tetramerik melalui ikatan hidrogen.

Kata Kunci: alkaloid SA2014, Cinachyrella anomala, docking molekuler, kanker payudara T47D, protein p53.

