

Seleksi Senyawa Bioaktif Alami Dengan Aktifitas Pada Protein EGFR dan AKT1 Berpotensi Anti-Kanker Anti-Obesitas Untuk Pasien TNBC dengan Obesitas. Studi In silico

Christina J. R. Esmaralda Lumbantobing^{1*}, Muhammad Rezki Rasyak^{2 **}, OK Yulizal³, Ermi Girsang⁴

1. Department of Internal Medicine, Fakultas Kedokteran-Kedokteran Gigi- Ilmu Kesehatan, Universitas Prima Indonesia, Jl. Ayahanda No. 68 A, Medan, 20118, Indonesia

2. Eijkman Center for Molecular Biology, National Research and Innovation Agency, Jakarta, Indonesia

3. Fakultas Kedokteran-Kedokteran Gigi- Ilmu Kesehatan, Universitas Prima Indonesia, Jl. Ayahanda No. 68 A, Medan, 20118, Indonesia

4. Program Studi S3 Kedokteran, Fakultas Kedokteran-Kedokteran Gigi- Ilmu Kesehatan, Universitas Prima Indonesia, Jl. Ayahanda No. 68 A, Medan, 20118, Indonesia

e-mail: *lumbantobingchris@gmail.com, **rezkirasyak@gmail.com

Abstrak

Riset ini menseleksi senyawa bioaktif alami (SBAA) yang memiliki aktifitas pada protein target pada obesitas dan kanker payudara tripel negatif (KPTN) untuk diteliti lebih lanjut dalam riset pengembangan obat terapi KPTN pada individu obes. Riset ini mendesain urutan langkah-langkah in silico dalam proses seleksi SBAA tersebut. Data diperoleh dari literatur yang mengkaji senyawa bioaktif alami yang bermanfaat untuk KPTN dan obesitas, dengan memanfaatkan metode in silico dengan penambatan molekuler dan deep learning. Artikel-artikel riset mengenai KPTN dan obesitas sering mengkaji resveratrol, quercetin, epigallocatechin gallate, genistein, dan curcumin. Analisis terhadap nilai afinitas binding ΔG penambatan protein-ligan menunjukkan nilai yang lebih rendah daripada nilai afinitas binding ligan kontrol atau ligan referen, mengindikasikan kemungkinan lebih baik ikatan ligan dengan protein. Kontrol ligan untuk protein EGFR menunjukkan nilai afinitas binding -9.4 kcal/mol, sedangkan ligand yang lebih baik adalah rutin dengan ΔG -11.5 kcal/mol, curcumin -10.3 kcal/mol, tangeritin -10 kcal/mol, dan honokiol -9.8 kcal/mol. Kontrol ligan untuk protein AKT1 menunjukkan ΔG -8.6 kcal/mol, dengan ligand dengan binding lebih baik ditunjukkan oleh honokiol (-9 kcal/mol). Afinitas binding (ΔG) rutin, curcumin, tangeritin, dan honokiol superior terhadap kontrol ligan untuk protein EGFR. Untuk protein AKT1, afinitas binding honokiol lebih baik daripada kontrol.