

ABSTRAK

Nama : Daini Amanah
Program Studi : Farmasi
Judul Skripsi : *Molecular Docking* Senyawa Aktif Daun Pucuk Merah (*Syzygium myrtifolium* Walp.) Pada Reseptor Leukotrien A4 Hidrolase Sebagai Antikanker Kolorektal

Kanker kolorektal adalah pertumbuhan sel abnormal yang terjadi di usus besar atau rektum. Pengembangan obat untuk terapi kanker kolorektal terus dilakukan. Senyawa aktif yang terdapat pada daun pucuk merah (*Syzygium myrtifolium* Walp.) seperti flavonoid, fenolik, dan asam betulinat diketahui memiliki aktivitas farmakologi. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mencari senyawa aktif yang terdapat dalam daun *Syzygium myrtifolium* Walp. yang mempunyai aktivitas sebagai antikanker dengan cara menghambat protein leukotrien A4 hidrolase. Metode *molecular docking* digunakan untuk memprediksi aktivitas dan afinitas antara ligan-protein. Penelitian dilakukan secara *in silico* pada senyawa aktif daun *Syzygium myrtifolium* Walp. yang memenuhi kriteria *Lipinski's rule of five* terhadap leukotrien A4 hidrolase dengan kode PDB 3U9W. Perangkat lunak yang digunakan yaitu YASARA, MarvinSketch, dan PLANTS yang merupakan suatu perangkat lunak yang dapat mengoptimasi ligan serta menambatkan molekul ligan dengan reseptor. Kemudian divisualisasikan menggunakan Discovery Studio dan dianalisis prediksi ADMET. Hasil *docking* menunjukkan bahwa empat senyawa aktif dari daun *Syzygium myrtifolium* Walp. yaitu bis (2-etilheksil) heksanadioat, 3-octadecyne, 1-oktadekena, dan (2E,6E)-farnesol memiliki skor *docking* yang lebih rendah dengan skor *docking* berturut-turut adalah -115.502, -113.790, -112.531, dan -106.599 dibandingkan bestatin -104.601. Dapat disimpulkan bahwa keempat senyawa uji ini memiliki potensi sebagai kandidat senyawa antikanker kolorektal.

Kata kunci:

Antikanker, kanker kolorektal, LTA4H, *molecular docking*, *Syzygium myrtifolium* Walp.

ABSTRACT

Name : Daini Amanah
Major : Pharmacy
Title : Molecular Docking of Active Compounds of *Syzygium myrtifolium* Walp. Leaves on Leukotriene A4 Hydrolase Receptors as Colorectal Anticancer

Colorectal cancer is an abnormal cell growth that occurs in the colon or rectum. Active compounds found in *Syzygium myrtifolium* Walp. leaves such as flavonoids, phenolics, and betulinic acid are known to have pharmacological activities. The purpose of this study was to find active compounds found in the leaves of *Syzygium myrtifolium* Walp. which have anticancer activity by inhibiting the protein leukotriene A4 hydrolase. Molecular docking methods are used to predict the activity and affinity between ligands-proteins. The study was conducted in silico on the active compound in the leaves of *Syzygium myrtifolium* Walp. which met the five criteria of Lipinski's rule of leukotriene A4 hydrolase with PDB code 3U9W. The software used is YASARA, MarvinSketch, and PLANTS which are programs that can optimize ligands and bind ligand molecules to receptors. Then it was visualized using Discovery Studio and ADMET prediction analysis was carried out. The docking results showed that the four active compounds from the *Syzygium myrtifolium* Walp., namely bis (2-ethylhexyl) hexanedioate, 3-octadecyne, 1-octadecene, and (2E,6E)-farnesol, had lower docking scores, respectively docking to -115.502, -113.790, -112.531, and -106.599 while bestatin -104.601. It can be concluded that the four tested compounds have potential as colorectal anticancer compound candidates.

Keywords:

Anti-cancer, colorectal cancer, LTA4H, molecular docking, *Syzygium myrtifolium* Walp.