

**PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA TURUNAN SARSASAPOGENIN SEBAGAI  
KANDIDAT INHIBITOR PADA SEL KANKER PAYUDARA PROTEIN Bcl2-xL  
(B-cell lymphoma 2-extra large)**

UMMI MUSTAFIDATUL JANNAH

14/365703/PA/16139

**INTISARI**

Telah dilakukan penambatan molekul senyawa turunan sarsasapogenin sebagai kandidat inhibitor pada sel kanker payudara protein Bcl2-xL (*B-cell lymphoma 2-extra large*). Tujuan dari penelitian ini adalah mencari konformasi yang paling stabil dari ligan senyawa turunan sarsasapogenin dengan protein Bcl2-xL melalui penambatan molekul dan mendapatkan senyawa turunan sarsapogenin yang paling efektif sebagai senyawa kandidat inhibitor sel kanker payudara.

Penelitian dilakukan dalam empat tahap. Pada tahap pertama dilakukan pengumpulan data sekunder berupa aktifitas senyawa-senyawa turunan sarsasapogenin terhadap sel kanker payudara. Tahap ke dua adalah membuat model senyawa-senyawa turunan sarsasapogenin dan dilanjutkan dengan optimasi geometri. Tahap ke tiga adalah melakukan penambatan molekul senyawa turunan sarsasapogenin yang diprediksi memiliki aktifitas sel kanker. Tahap ke empat adalah melakukan visualisasi senyawa hasil penambatan molekul.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa turunan sarsasapogenin yang memiliki nilai  $\Delta G$  paling rendah yaitu pada senyawa 5c, 5h, 5n dan 5o dengan nilai  $\Delta G$  masing-masing adalah -10; -10; -9.8; dan -9.8 kcal/mol. Senyawa 5n dan 5h merupakan senyawa turunan sarsapogenin yang paling efektif sebagai senyawa kandidat inhibitor sel kanker payudara karena memiliki panjang ikatan hidrogen paling kecil, yaitu 3,06Å dan 3,07Å. Senyawa 5n dan 5h memiliki ikatan hidrogen yang paling stabil dan berpotensi memiliki aktivitas antikanker yang baik.

Kata kunci : sarsasapogenin, Bcl2-xL, penambatan molekul.

**MOLECULAR DOCKING OF SARSASAPOGENIN DERIVATIVE COMPOUNDS AS A  
INHIBITOR CANDIDATE IN BREAST CANCER CELLS PROTEIN Bcl2-xL  
(B-cell lymphoma 2-extra large)**

UMMI MUSTAFIDATUL JANNAH

14/365703/PA/16139

**ABSTRACT**

Molecular docking of sarsasapogenin derivative compounds as a inhibitor candidate in breast cancer cells protein Bcl2-xL (B-cell lymphoma 2-extra large) had been done. The purpose of this study is to find the most stable ligand conformation of the sarsasapogenin derivative compound with Bcl2-xL protein through molecular docking and obtain the most effective sarsapogenin derivative compound as a candidate inhibitor in breast cancer cell.

The research was conducted in four stages. In the first stage, secondary data collection was carried out in the form of the activity of sarsasapogenin derivative compounds against breast cancer cells. The second stage was to make a model of the compounds that have been collected and continue with geometry optimization. The third stage was molecular docking of sarsasapogenin derivative compound which was predicted to have cancer cell activity. The fourth stage was to visualize the result of the molecular docking.

The results showed that the sarsasapogenin derivate compounds that had the lowest value of  $\Delta G$  was 5c, 5h, 5n and 5o compounds with each value of  $\Delta G$  was -10; -10; -9.8; dan -9.8 kcal/mol. The 5n and 5h compound had the most effective derivative of sarsapogenin as a candidate inhibitor in breast cancer cell because had the smallest hydrogen bond length, which is 3,06Å and 3,07Å. The 5n and 5h compound had the most stable hydrogen bond and has the potential to have good anticancer activity.

Keywords : sarsasapogenin, Bcl2-xL, molecular docking.