

INTISARI

PRATAMA, B.P., 2020, STUDI DOCKING MOLEKULER SENYAWA DALAM MINYAK ATSIRI PALA (*Myristica fragrans* H.) DAN SENYAWA TURUNAN MIRISTISIN TERHADAP TARGET TERAPI KANKER KULIT. SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA.

Kanker kulit adalah penyakit di mana kulit kehilangan kemampuannya untuk regenerasi dan tumbuh secara normal. Penyebab umum terjadinya kanker kulit adalah intensitas paparan sinar UVB. Penelitian terdahulu telah membuktikan kandungan senyawa di dalam minyak atsiri pala (*Myristica fragrans* H.) khususnya miristisin memiliki khasiat sebagai antioksidan dan efek *cytotoxic*.

Telah dilakukan skrining target molekuler dari kandungan kimia minyak atsiri pala beserta turunan miristisin-nya terhadap target molekuler antikanker kulit antara lain *Heat Shock Protein 90* (HSP90A), *Prostaglandin Synthase 2* (PTGS2) dan *Dihydroorotate Dehidrogenase* (DHODH), dan memprediksi interaksi senyawa dari ke 61 ligan uji dengan target molekuler tersebut, kemudian dilakukan *docking* molekuler menggunakan perangkat lunak PyRx 0.8.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa dalam minyak atsiri pala yaitu Guanicin memiliki nilai ΔG_{bind} yang baik pada HSP90A dengan nilai -8,2 kkal/mol. Hasil docking antara protein PTGS2 dan DHODH dengan ligan baik dari senyawa dalam minyak atsiri pala maupun senyawa turunan miristisin menunjukkan bahwa hampir semua ligan dapat berinteraksi dengan kedua target dengan ligan yang nilai ΔG_{bind} paling kecil dan memiliki model interaksi terbaik dari senyawa minyak atsiri pala adalah asam dihidroguaiaretik, dengan nilai ΔG_{bind} secara berurut-urut sebesar -8,1 kkal/mol dan -9,3 kkal/mol.

Kata kunci : kanker kulit, minyak atsiri, *Myristica fragrans* H., *docking* molekuler

ABSTRAK

PRATAMA B.P., 2020. STUDY OF MOLECULAR DOCKING COMPOUNDS OF NUTMEG ESSENTIAL OILS (*Myristica fragrans* H.) AND COMPOUND OF MYRISTICIN DERIVATIVES AGAINST SKIN CANCER THERAPY TARGETS. SKRIPSI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA.

Skin cancer is a disease in which the skin loses its ability to regenerate and grow normally. A common cause of skin cancer is the intensity of UVB exposure. Previous research has proven the content of compounds in nutmeg essential oil (*Myristica fragrans* H.) especially myristicin has antioxidant properties and cytotoxic effects.

Molecular target screening of the chemical content of nutmeg essential oil and myristicin derivatives for molecular targets of skin cancer was included *Heat Shock Protein 90* (HSP90A), *Prostaglandin Synthase 2* (PTGS2) and *Dihydroorotate Dehydrogenase* (DHODH), and interaction were predicted of the 61 test ligands with these molecular targets, then molecular docking is done using PyRx 0.8 software.

The results showed that the compound in nutmeg essential oil namely Guanicin had value ΔG_{bind} is good at HSP90A with a value of -8.2 kcal / mol. The docking results between PTGS2 and DHODH proteins with ligands from both compounds in nutmeg essential oil and myristicin derived compounds showed that almost all ligands can interact with both targets with ligands with the lowest ΔG_{bind} value and have the best interaction model of nutmeg atisi oil compound is dihydroguaiaretic acid with ΔG_{bind} values of -8.1 kcal /mol and -9.3 kcal /mol.

Keywords: Skin cancer, essential oils, *Myristica fragrans* H., molecular docking