

ANALISIS *IN SILICO* INTERAKSI MOLEKUL *MARICAFFEOYLIDE* DARI *Avicennia marina* TERHADAP RESEPTOR *TUMOR NECROSIS FACTOR* MELALUI *DOCKING* MOLEKULER

Nilu Fadila Ulya
Program Studi S1 Farmasi
Universitas Al-Irsyad Cilacap

ABSTRAK

Metabolit bioaktif dari buah *Avicennia marina* menyebabkan isolasi dari turunan *caffeoyl* baru yaitu *maricaffeoylide*, yang merupakan golongan senyawa fenolik seperti asam kafeat yang diprediksi berpotensi sebagai antikanker, anti inflamasi, dan senyawa antioksidan. Salah satu agen yang berperan dalam mengatur sel imun terhadap kanker adalah *Tumor Necrosis Factor*. *Tumor Necrosis Factor* merupakan sitokin proinflamasi yang berperan dalam mengatur sel imun. Tujuan penelitian ini yaitu untuk mengetahui interaksi yang terjadi antara molekul *maricaffeoylide* dan turunannya terhadap reseptor TNF secara *in silico* melalui *docking* molekuler. Metode yang digunakan dalam penelitian ini yaitu eksperimental yang dilakukan secara *in silico* dengan penambatan molekul. Hasil dari penelitian ini menunjukkan bahwa senyawa *maricaffeoylide* dan turunannya dapat berinteraksi dengan reseptor *Tumor Necrosis Factor*. Interaksi yang terjadi yaitu adanya ikatan hidrogen, ikatan van der waals, ikatan karbon hidrogen, dan ikatan alkil. Senyawa *maricaffeoylide* dan turunannya memiliki hasil *docking* yaitu -6,1; -6,3 dan -6,7 serta terdapat residu asam amino yang sama dengan senyawa ligan asli (TNF-alpha Inhibitor) dan ligan pembanding (Infliximab). Persamaan residu menandakan bahwa senyawa *maricaffeoylide* dan turunannya dapat menjadi kandidat sebagai anti kanker.

Kata kunci: *in silico, maricaffeoylide, tumor necrosis factor*

IN SILICO ANALYSIS OF THE INTERACTION OF MARICAFFEOYLIDE MOLECULES FROM *Avicennia marina* ON TUMOR NECROSIS FACTOR RECEPTOR THROUGH MOLECULAR DOCKING

Nila Fadila Ulya

Departement of Pharmacy, UNIVERSITAS AL-IRSYAD CILACAP

ABSTRACT

*Bioactive metabolites from *Avicennia marina* fruit caused the isolation of a new caffeoyl derivative, namely maricaffeoylide, which is a class of phenolic compounds such as caffeic acid which is predicted to have potential as anticancer, anti-inflammatory, and antioxidant compounds. One of the agents that play a role in regulating immune cells against cancer is Tumor Necrosis Factor. Tumor necrosis factor is a proinflammatory cytokine that plays a role in regulating immune cells. The purpose of this study was to determine the interaction that occurs between the maricaffeoylide molecule and its derivatives against the TNF receptor in silico through molecular docking. The method used in this research is experimental which is carried out in silico with molecular anchoring. The results of this study indicate that maricaffeoylide compounds and their derivatives can interact with the Tumor Necrosis Factor receptor. The interactions that occur are the presence of hydrogen bonds, van der Waals bonds, hydrogen carbon bonds, and alkyl bonds. Maricaffeoylide compounds and their derivatives have docking results, namely -6.1; -6.3 and -6.7 and contained the same amino acid residues as the original ligand (TNF-alpha Inhibitor) and the comparison ligand (Infliximab). The residual equation indicates that the maricaffeoylide compound and its derivatives can be candidates as anti-cancer.*

Keyword: *in silico, maricaffeoylide, tumor necrosis factor*