

**ANALISIS INTERAKSI SENYAWA AKTIF HERBAL YANG  
BERPOTENSI SEBAGAI ANTIKANKER TERHADAP  
RESEPTOR PD-1 SECARA *IN SILICO* MELALUI  
*MOLECULAR DOCKING***

**Imroatul Azizah**

Program Studi S1 Farmasi  
Universitas Al-Irsyad Cilacap

**ABSTRAK**

Imunoterapi mulai diminati karena memiliki efektivitas terapi lebih baik daripada terapi kanker lainnya. Salah satu agen yang berperan dalam mengatur sel imun terhadap kanker adalah *programmed cell death 1* (PD-1) yang merupakan sitokin proinflamasi. Beberapa tanaman herbal mengandung metabolit sekunder yang berpotensi sebagai antikanker seperti *maricaffeoylide*, *n-Butyldenepththalide*, *flindersin*, *astragaloseide IV*, dan *xanthorrhizol*. Tujuan penelitian ini yaitu untuk mengetahui interaksi yang terjadi antara molekul *maricaffeoylide*, *n-Butyldenepththalide*, *flindersin*, *astragaloseide IV*, dan *xanthorrhizol* terhadap reseptor PD-1 secara *in silico* melalui *molecular docking*. Metode yang digunakan dalam penelitian ini yaitu eksperimental secara *in silico* melalui penambatan molekul yang meliputi tahap preparasi ligan dan reseptor, analisa *Lipinski Rule of Five*, validasi *gridbox*, penambatan molekul, validasi RMSD, dan visualisasi struktur. Hasil dari penelitian ini adalah senyawa *maricaffeoylide*, *n-Butyldenepththalide*, *flindersin*, *astragaloseide IV*, dan *xanthorrhizol* dapat berinteraksi dengan reseptor PD-1. Interaksi yang terjadi menghasilkan terbentuknya ikatan hidrogen, pi-alkil, pi-pi stacked, alkil, hidrogen karbon, dan pi-sigma. Senyawa aktif menghambat dengan energi ikatan *maricaffeoylide* sebesar -6,1; *n-butylidenepththalide* -6,3; *flindersin* -7,1; *astragaloside-IV* -6,8 dan *xanthorrhizol* -6,1 dengan nilai RMSD 0. Interaksi *n-Butyldenepththalide* terhadap reseptor PD-1 menghasilkan terbentuknya residu asam amino yang sama dengan ligan pembanding pada ikatan alkil yaitu ALA (alanin) 129 dengan panjang ikatan 3.97 Å. Persamaan residu menunjukkan bahwa senyawa tersebut memiliki aktivitas yang sama dan dapat digunakan sebagai antikanker.

**Kata kunci:** senyawa aktif herbal, imunoterapi, *programmed cell death 1*, *in silico*

# INTERACTION ANALYSIS OF ACTIVE HERBAL COMPOUNDS THAT POTENTIALLY AS ANTICANCER AGAINST PD-1 RECEPTORS ARE IN SILICO THROUGH MOLECULAR DOCKING

**Imroatul Azizah**

*Program Study Of Pharmacy, UNIVERSITAS AL-IRSYAD CILACAP*

## ABSTRACT

*Immunotherapy is gaining interest because it has better therapeutic effectiveness than other cancer therapies. One of the agents that play a role in regulating immune cells against cancer is programmed cell death 1 (PD-1), which is a pro-inflammatory cytokine. Several herbal plants contain secondary metabolites that have potential as anticancer such as maricaffeoylide, n-Butyldenepththalide, flindersin, astragaloseide IV, and xanthorrhizol. The purpose of this study was to determine the interactions that occur between maricaffeoylide, n-Butyldenepththalide, flindersin, astragaloseide IV, and xanthorrhizol molecules on the PD-1 receptor in silico through molecular docking. The method used in this study was in silico experimental through molecular docking which included ligand and receptor preparation, Lipinski Rule of Five analysis, gridbox validation, molecular docking, RMSD validation, and structure visualization. The results of this study showed that the compounds maricaffeoylide, n-Butyldenepththalide, flindersin, astragaloseide IV, and xanthorrhizol can interact with the PD-1 receptor. The interactions that occur result in the formation of hydrogen bonds, pi-alkyl, pi-pi stetched, alkyl, carbon hydrogen, and pi-sigma. The active compound inhibits with a maricaffeoylide bond energy of -6.1; n-butylidenepththalide -6,3; flindersin -7.1; astragaloside-IV -6.8 and xanthorrhizol -6.1 with an RMSD value of 0. The interaction of n-Butyldenepththalide with the PD-1 receptor results in the formation of the same amino acid residue as the reference ligand in the alkyl bond, namely ALA (alanine) 129 with a bond length of 3.97 Å. The residue equation shows that these compounds have the same activity and can be used as anticancer.*

**Keywords:** *herbal active compounds, immunotherapy, programmed cell death 1, in silico*