

## ABSTRAK

### UJI *IN SILICO* SENYAWA AKTIF SPONS *Stylissa massa* (Carter, 1887) TERHADAP PROTEIN SEL KANKER KULIT

Oleh

ARTIKA ADELIA

Studi bioprospeksi menyatakan bahwa spons laut merupakan sumber senyawa antikanker yang paling produktif. Spons memiliki senyawa metabolit sekunder yang berpotensi dalam bidang farmakologi. Senyawa tersebut memiliki aktivitas antiinflamasi, antiparasit, antibakteri, dan antikanker. Spons *S. massa* merupakan salah satu spons yang memiliki senyawa antikanker, dan salah satunya adalah kanker kulit. Kanker kulit merupakan pertumbuhan yang berlebihan pada jaringan kulit yang mengenai sebagian atau seluruh lapisan kulit, sehingga mengakibatkan terbentuknya lesi massa. Penelitian bertujuan untuk mengidentifikasi senyawa aktif potensial antikanker kulit dari ekstrak spons *S. massa* secara *in silico*. Metode penelitian yang digunakan adalah *molecular docking*. Berdasarkan hasil penelitian didapatkan satu senyawa antikanker kulit dan satu protein target yang dapat dilanjutkan dalam proses *docking*. Senyawa antikanker kulit tersebut adalah asam flufenamat yang di-*docking* dengan protein target kulit BRAF (ligan 1UWH dan 6P3D). Ligan 1UWH menghasilkan nilai *binding affinity* sebesar -9,7 dan nilai RMSD 0,852 *Angstrong*. Ligan 6P3D menghasilkan nilai *binding affinity* sebesar -13,5 dan nilai RMSD sebesar 0,646 *Angstrong*. Hasil penelitian dapat disimpulkan bahwa ekstrak spons *S. massa* memiliki satu senyawa aktif (asam flufenamat) sebagai antikanker kulit yang diprediksi memiliki mekanisme molekuler sebagai inhibitor terhadap protein sel kanker kulit.

Kata kunci: *In Silico*, Kanker Kulit, *Molecular Docking*, *Stylissa massa*

## ABSTRACT

### IN SILICO TESTING OF ACTIVE COMPOUNDS OF THE *Stylissa massa* Sponge (Carter, 1887) ON SKIN CANCER CELL PROTEINS

By

ARTIKA ADELIA

Bioprospection studies suggest that marine sponges are the most prolific source of anticancer compounds. Sponges have secondary metabolite compounds that have potential in pharmacology. These compounds have anti-inflammatory, antiparasitic, antibacterial, and anticancer activities. *S. massa* is one of the sponges that has anticancer compounds, and one of them is skin cancer. Skin cancer is an excessive growth of skin tissue that affects some or all layers of the skin, resulting in the formation of mass lesions. The study aimed to identify potential active compounds of skin anticancer from *S. massa* sponge extract in silico. The research method used was molecular docking. Based on the results, one skin anticancer compound and one target protein were obtained that can be continued in the docking process. The skin anticancer compound is flufenamic acid docked with BRAF skin target protein (ligands 1UWH and 6P3D). Ligand 1UWH produced a binding affinity value of -9.7 and RMSD value of 0.852 Angstrong. The 6P3D ligand produced a binding affinity value of -13.5 and an RMSD value of 0.646 Angstrong. The results can be concluded that *S. massa* sponge extract has one active compound (flufenamic acid) as a skin anticancer which is predicted to have a molecular mechanism as an inhibitor of skin cancer cell proteins.

Keywords: In Silico, Molecular Docking, Skin Cancer, *Stylissa massa*