

INTISARI

Kanker rongga mulut merupakan bagian dari kanker kepala dan leher, yang berkembang di setiap tempat dari rongga mulut atau orofaring yang pada umumnya disebabkan oleh *Oral Squamous Cell Carcinoma* (OSCC). Tujuan dari penelitian ini adalah untuk menemukan senyawa *marker* dari tumbuhan obat khas Indonesia sebagai agen yang berpotensi untuk antikanker secara komputasi.

Metode yang digunakan adalah metode *in silico*, yaitu dengan melakukan *molecular docking* menggunakan perangkat lunak PLANTS. Senyawa *marker* didapatkan dari Farmakope Herbal Indonesia edisi 2008 dan 2011, kemudian senyawa *marker* dikelompokkan menjadi 4 kelompok, yaitu (i) alkaloid, (ii) flavonoid, (iii) fenolik, (iv) terpenoid dan minyak atsiri, dengan senyawa pembanding yaitu *(1S)-6-Chloro-2,3,4,9-Tetrahydro-1H-Carbazole-1-Carboxamide* (OCZ) yang merupakan ligan asli protein *Sirtuin-3* yang diuji, Resveratrol dan Oroxylin A. Analisis hasil penelitian ini berupa perbandingan skor penambatan dari masing-masing golongan senyawa yang diuji dan hasil visualisasi menggunakan aplikasi *Visual Molecular Dynamics* (VMD).

Hasil penelitian ini menunjukkan beberapa senyawa dari masing-masing golongan senyawa *marker* berpotensi baik sebagai agen antikanker, yaitu shogaol (fenolik) dengan skor penambatan -105.703, piperin (alkaloid) dengan skor -90.1175, filantin (flavonoid) dengan skor -89.7129, dan xanthorizol (terpenoid) dengan skor -86.2055. Skor senyawa pembanding OCZ -90.7912, Resveratrol -78.2063, Oroxylin A -70.5626. Hasil visualisasi menunjukkan bahwa senyawa uji dan senyawa pembanding melekat pada residu yang sama, yaitu threonin ke-227. Dari hasil penambatan molekul senyawa *marker* dari masing-masing golongan dapat diprediksikan berpotensi sebagai senyawa antikanker oral dengan cara aktivasi enzim *Sirtuin-3*.

Kata kunci: Kanker oral, *Sirtuin-3*, *In silico*, Senyawa *marker*

ABSTRACT

Oral cancer is a kind of head and neck cancers, that is developed from mouth or orofaring and commonly caused by Oral Squamous Cell Carcinoma (OSCC). The purpose of this research is to find the marker compound that contained in Indonesian herbal medicines as the anticancer agents by computational method.

The method of this research was *in silico*, that was a molecular docking by using PLANTS software. The marker compound were taken from the Indonesian Herbal Pharmacopoeia 2008 and 2011 edition, four groups of marker compound were used for molecular docking, those were (i) alkaloids, (ii) flavonoids, (iii) fenolics, (iv) terpenoids and the essential oils. Meanwhile the standard compound for comparison were *(1S)-6-Chloro-2,3,4,9-Tetrahydro-1H-Carbazole-1-Carboxamide* (OCZ) the native ligand of Sirtuin-3, Resveratrol and Oroxylin A. In this research, the analysis was conducted by comparing the docking score of the marker compound to the standard and visualizing the molecular docking by using Visual Molecular Dynamics (VMD).

The results of this research showed that there were several marker compounds that potentially can be used for anticancer agents, those were shogaol (fenolics) with docking score -105.703, piperin (alkaloids) -90.1175, filantine (flavonoids) with docking score -89.7129, and xanthorizol (terpenoids) with docking score -86.2055. The docking score of the standard compounds were OCZ = -90.7912, Resveratrol = -78.2063, and Oroxylin A = -70.5626. The results of visualization showed that the marker compounds and the standard compounds were bonded with the same residue, that was threonine 227. Based on the results of the molecular docking of the marker compounds from each groups could be predicted as the oral anticancer agents by activating Sirtuin-3 enzyme.

Keywords: Oral cancer, Sirtuin-3, *In silico*, Marker compounds