

ABSTRACT

Screening for Breast Anticancer Compounds in Peaches (*Prunus persica* L.) with ER- β Activation through Molecular Docking

Erni Murniningsih, Syaiful Prayogi, Luthfi Hidayat Maulana

Email: erniff.mnsh11@gmail.com

*One of the leading causes of cancer-related mortality among females is breast cancer. We need to find ways to harness the power of natural ingredients to create more targeted and selective therapies for breast cancer. Peaches (*Prunus persica* L.) contain secondary metabolite compounds that inhibit the metastasis of breast cancer cells, giving them anticancer properties. This study's objective is to use molecular docking to identify peach (*Prunus persica* L.) compounds with breast cancer-fighting potential, and to examine the interaction between peach compounds' anticancer activity and ER- β receptors. Investigating the molecular docking method's ability to identify ligand-receptor complexes and the binding effects of ligands derived from plant compounds with receptors—a protein target for breast cancer—represents the exploratory qualitative research here. The process of molecular docking involved multiple steps, such as modelling and optimising compound structures, preparing the ER- β protein, validating docking, running the docking process, and visualising interactions. Based on the binding energy values of (-7,1), (-7,4), and (7,2) and different bonds in hydrophobic, electrostatic, and hydrogen forms, the results demonstrated that peach catechi compounds, Cyanidin-3-O-rutinoside, and Quercetin-3-O-rutinoside may have anti-breast cancer potential. Among the existing drug candidates for breast cancer, cyanidin-3-O-rutinoside has the most promise through ER- β activation.*

Keywords: Breast cancer, cyanidin-3-O-rutinoside, estrogen receptor, molecular docking, peaches.

ABSTRAK

Skrining Senyawa Antikanker Payudara Pada Buah Persik (*Prunus persica* L.) dengan Aktivasi ER- β melalui *Molecular Docking*

Erni Murniningsih, Syaiful Prayogi, Luthfi Hidayat Maulana

Email: erniff.mnsh11@gmail.com

Salah satu penyebab utama kematian akibat kanker di kalangan wanita adalah kanker payudara. Kita perlu menemukan cara untuk memanfaatkan kekuatan bahan-bahan alami untuk menciptakan terapi kanker payudara yang lebih bertarget dan selektif. Persik (*Prunus persica* L.) mengandung senyawa metabolit sekunder yang menghambat metastasis sel kanker payudara sehingga memberikan sifat antikanker. Tujuan penelitian ini adalah menggunakan docking molekuler untuk mengidentifikasi senyawa buah persik (*Prunus persica* L.) yang berpotensi melawan kanker payudara, dan untuk menguji interaksi antara aktivitas antikanker senyawa buah persik dan reseptor ER- β . Menyelidiki kemampuan metode docking molekuler untuk mengidentifikasi kompleks ligan-reseptor dan efek pengikatan ligan yang berasal dari senyawa tanaman dengan reseptor—target protein untuk kanker payudara—mewakili penelitian kualitatif eksplorasi di sini. Proses docking molekuler melibatkan beberapa langkah, seperti pemodelan dan optimalisasi struktur senyawa, penyiapan protein ER- β , validasi docking, menjalankan proses docking, dan visualisasi interaksi. Berdasarkan nilai energi ikat (-7.1), (-7.4), dan (7.2) serta perbedaan ikatan dalam bentuk hidrofobik, elektrostatik, dan hidrogen, diperoleh hasil senyawa peach catechi, Cyanidin-3 -O-rutinoside, dan Quercetin-3-O-rutinoside mungkin memiliki potensi anti-kanker payudara. Di antara kandidat obat kanker payudara yang ada, cyanidin-3-O-rutinoside memiliki harapan paling besar melalui aktivasi ER- β .

Kata kunci: Buah persik, cyanidin 3-O-rutinoside, estrogen reseptor, kanker payudara, *molecular docking*.