

ABSTRACT

STUDY OF DOCKING OF FLAVONOID COMPOUNDS FROM THE KEY FUNERAL PLANT (*Boesenbergia pandurata*) ON ESTROGEN RECEPTOR ALFA (ER- α) AS BREAST ANTICANCER

Kharisma Arsyifatin Nadiyah, Tunjung Winarno, Syaiful Prayogi

Email: syifa.nadiyah06@gmail.com

*Breast cancer is one of the world's health diseases with the main cause of death. The ER- α protein plays a role in regulating the development and function of female reproduction, or it is also known as an opportunity for chemotherapeutic agents. One of the traditional plants with the most potential for treatment is Temu Kunci (*Boesenbergia pandurata*) which contains various secondary metabolites, one of which is flavonoids. In several studies, flavonoid compounds have anticancer bioactivity. The aim of the research is to determine which compounds from the flavonoid class of curcuma key have anti-breast cancer activity through molecular docking, as well as to analyze the anti-breast cancer activity of flavonoid class compounds from curcuma key to the ER- α protein. This research is an exploratory qualitative research by identifying the complexation and effects of combining ligands derived from plant compounds with target proteins from breast cancer using the in silico molecular docking method. Compound structure optimization, ER- α protein preparation, docking validation, docking process, and interaction visualization. The results of the study showed that the flavonoid compounds from temu Kunci, namely (-)-isopanduratin A₂, 5-dimethoxy-3,7-dimethoxyflavone, (+)-4-hydroxypanduratin A, rubranin and panduratin G have potential as breast anticancer as indicated by the rerank score value namely -142,113 kcal/mol, -140,535 kcal/mol, -139,949 kcal/mol, -139,918 kcal/mol, -137,929 kcal/mol and the bonds formed are hydrophobic and hydrogen. Conclusion: The compound with the most potential as a new drug candidate for breast cancer through ER- α activation is (-)-isopanduratin A₂ with the lowest rerank score value, namely -142,113 kcal/mol and various bonds in the form of hydrophobic, electrostatic and hydrogen*

Keywords : ER- α , flavonoids, breast cancer, molecular docking, fingerroot

ABSTRAK

KAJIAN *DOCKING* SENYAWA GOLONGAN FLAVONOID DARI TANAMAN TEMU KUNCI (*Boesenbergia pandurata*) TERHADAP ESTROGEN RESEPTOR ALFA (ER- α) SEBAGAI ANTIKANKER PAYUDARA

Kharisma Arsyifatin Nadiyah, Tunjung Winarno, Syaiful Prayogi

Email: svifa.nadiyah06@gmail.com

Kanker payudara merupakan salah satu penyakit kesehatan dunia dengan penyebab utama kematian. Protein ER- α berperan dalam mengatur perkembangan dan fungsi reproduksi wanita, atau disebut juga sebagai peluang agen kemoterapi. Salah satu tanaman tradisional yang paling potensial untuk pengobatan adalah Temu Kunci (*Boesenbergia pandurata*) yang mengandung berbagai metabolit sekunder salah satunya flavonoid. Senyawa golongan flavonoid pada beberapa penelitian memiliki bioaktivitas sebagai antikanker. Tujuan penelitian untuk mengetahui senyawa golongan flavonoid dari temu kunci yang memiliki aktivitas sebagai antikanker payudara melalui *molecular docking*, serta menganalisis bagaimana aktivitas antikanker payudara pada senyawa golongan flavonoid dari temu kunci terhadap protein ER- α . Penelitian ini merupakan penelitian kualitatif eksploratif dengan mengidentifikasi kompleksasi dan efek dari penyatuan ligan yang berasal dari senyawa tanaman dengan protein target dari penyakit kanker payudara menggunakan metode *molecular docking* secara *in silico*. optimasi struktur senyawa, preparasi protein ER- α , validasi *docking*, proses *docking*, dan visualisasi interaksi. Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa golongan flavonoid dari temu kunci yaitu (-)-isopanduratin A₂, 5-hidroksi-3,7-dimetoksiflavon, (+)-4-hidroksipanduratin A, rubranin dan panduratin G berpotensi sebagai antikanker payudara yang ditunjukkan nilai *rerank score* yaitu -142.113 kcal/mol, -140.535 kcal/mol, -139.949 kcal/mol, -139.918 kcal/mol, -137.929 kcal/mol dan ikatan yang terbentuk berupa hidrofobik dan hidrogen. Kesimpulan: senyawa paling berpotensi sebagai kandidat obat baru kanker payudara melalui aktivasi ER- α adalah (-)-isopanduratin A₂ dengan nilai *rerank score* yang paling rendah yaitu -142.113 kcal/mol dan berbagai ikatan berupa hidrofobik, elektrostatik, dan hidrogen

Kata kunci : ER- α , flavonoid, kanker payudara, *molecular docking*, temu kunci