

Analisis *Molecular Docking* Senyawa Golongan Flavonoid Daun Kersen (*Muntingia calabura L.*) Sebagai Inhibitor Terhadap Sel Kanker Payudara T47D

Kharisma Alifya Zulfa, Novia Najma Tsaqiba

ABSTRAK

Kanker payudara merupakan penyebab kematian terbanyak kedua pada wanita sebesar 13% setelah penyakit kardiovaskuler, sehingga diperlukan suatu pengembangan terapi terhadap kanker payudara yang memiliki target spesifik dan selektifitas yang tinggi dengan eksplorasi potensi bahan alam berkhasiat. Daun Kersen (*Muntingia calabura L.*) memiliki banyak senyawa potensial yang memiliki sifat anti kanker, salah satunya yaitu flavonoid. Tujuan penelitian ini yaitu untuk mengetahui afinitas turunan senyawa flavonoid dan senyawa yang paling potensial sebagai inhibitor reseptor sel kanker payudara T47D melalui pemodelan *molecular docking*. Pemodelan dilakukan pada reseptor *Human Estrogen Receptor Alpha* (kode PDB: 3ERT) dan *native ligand* Hydroxytamoxifen. Pengujian dilakukan menggunakan perangkat lunak AutoDock Tools-1.5.6., simulasi penambatan molekuler menggunakan PyRx 0,8 dan visualiasiasi hasil *docking* menggunakan YASARA. Hasil penelitian menunjukkan tujuh senyawa flavonoid dari daun kersen dengan nilai *binding affinity* yaitu kaempferol -8,1; taxifolin -7,9; kuarsetin -7,8; myracetin-7,0; flavone -6,9; luteolin -3,8; dan apigenin -2,0. Senyawa kaempferol merupakan senyawa turunan flavonoid yang paling berpotensi sebagai inhibitor kanker payudara sel T47D dengan nilai *binding affinity* terbesar yaitu -8,1 dan memiliki banyak asam amino yang sama dengan *native ligand*.

Kata kunci: Daun Kersen, Kanker Payudara, *Molecular Docking*, Flavanoid

Analysis of *Molecular Docking* of Flavonoid Group Compounds of Kersen Leaves (*Muntingia calabura L.*) As an inhibitor against T47D breast cancer cells

Kharisma Alifya Zulfa, Novia Najma Tsaqiba

ABSTRACT

Breast cancer is the second leading cause of death in women at 13% after cardiovascular disease, so it is necessary to develop therapies against breast cancer that have specific targets and high selectivity with exploration of the potential of efficacious natural ingredients. Kersen leaves (*Muntingia calabura L.*) have many potential compounds that have anti-cancer properties, one of which is flavonoids. The purpose of this study was to determine the affinity of flavonoid derivatives and the most potential compounds as T47D breast cancer cell receptor inhibitors through *molecular docking modeling*. Modeling was performed on the *Human Estrogen Receptor Alpha* receptor (PDB code: 3ERT) and the *native ligand* Hydroxytamoxifen. Tests were conducted using AutoDock Tools-1.5.6. software, molecular tethering simulation using PyRx 0.8 and visualization of docking results using YASARA. The results showed seven flavonoid compounds from cherry leaves with *binding affinity values* , namely kaempferol -8.1; taxifolin -7.9; quarttin -7.8; myracetin-7.0; flavone -6.9; luteolin -3.8; and apigenin -2.0. Kaempferol compounds are flavonoid derivative compounds that have the most potential as breast cancer inhibitors of T47D cells with the largest binding affinity value of -8.1 and have many amino acids in common with *native ligands*.

Keywords: Kersen Leaf, Breast Cancer, *Molecular Docking*, Flavanoid