

UJI IN SILLICO SENYAWA KAEMPFEROL SEBAGAI KOMPETITOR
ESTROGEN PADA RESEPTOR ESTROGEN ALFA KANKER
ENDOMETRIUM

SITI ROQAYAH

NIM 1147020066

ABSTRAK

Salah satu faktor perkembangan sel kanker endometrium yaitu ditandai dengan tingginya ekspresi reseptor estrogen alfa sehingga terjadi proliferasi sel. Saat ini, upaya pencegahan kanker endometrium menggunakan terapi hormon dengan tamoxifen yang bekerja sebagai antagonis reseptor estrogen namun memiliki efek samping terhadap kesehatan. Oleh karena itu perlu adanya alternatif lain yaitu dengan fitoestrogen. Senyawa kaempferol merupakan salah satu fitoestrogen. Penelitian ini menggunakan metode penambatan atau doking yang bertujuan untuk mendesain obat baru sebagai anti kanker dengan menguji senyawa kaempferol yang diharapkan dapat menjadi kompetitor estrogen dengan estrogen endogen RE α pada kanker endometrium yang nantinya dapat mencegah proliferasi sel. Penelitian ini dilaksanakan di Laboratorium Jurusan Biologi Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Gunung Djati Bandung, pada bulan Desember 2017 sampai dengan bulan Februari 2018. Perangkat lunak yang digunakan yaitu PyRx-Virtual Screening Tools dan Discovery Studio (untuk visualisasi pose dan analisis data). Hasil penelitian menunjukkan senyawa kaempferol berpotensi sebagai kompetitor estrogen. Hal tersebut ditunjukkan dengan nilai binding affinity (energi bebas) sebesar -7.0 kkal/mol. Jika dibandingkan dengan ligan estradiol yang memiliki nilai binding affinity -6.7 kkal/mol, nilai binding affinity pada kaempferol lebih rendah. Dibandingkan dengan ligan 3 alkil naftalen yang memiliki nilai binding affinity -7.3 kkal/mol, senyawa kaempferol memiliki nilai binding affinity yang lebih tinggi. Semakin rendah nilai binding affinity maka interaksi akan semakin stabil antara ligan dengan RE α .

Kata Kunci : Binding Affinity, Doking, Kaempferol, Reseptor Estrogen Alfa, RMSD

IN SILICO TEST OF KHAEMPFEROL AS ESTROGEN COMPETITOR ON ESTROGEN RECEPTOR ALPHA ENDOMETRIAL CANCER

SITI ROQAYAH

NIM 1147020066PETI

ABSTRACT

One factor in the development of endometrial cancer cells is characterized by high expression of estrogen receptors alpha resulting in cell proliferation. Currently, endometrial cancer prevention efforts use hormone therapy with tamoxifen that acts as an estrogen receptor antagonist but has side effects on health. Therefore, there is an alternative that is with phytoestrogens. The khaempferol compound is one of phytoestrogens. This study uses a method of tethering or dosing that aims to design new drugs as anti-cancer by testing khaempferol compounds are expected to become estrogen competitors with endogenous estrogen RE α in endometrial cancer that can prevent cell proliferation. This research was conducted at Laboratory of Biology Department of Science and Technology Faculty of UIN Sunan Gunung Djati Bandung, from December 2017 until February 2018. The software used is PyRx-Virtual Screening Tools and Discovery Studio (for pose visualization and data analysis). The results showed that khaempferol compounds have potential as estrogen competitor. This is indicated by the value of affinity binding (free energy) of -7.0 kcal/mol. When compared with the estradiol ligand which has an affinity b-value of -6.7 kcal / mol, the affinity binding value on the khaempferol is lower. Compared with ligand 3 alkyl naphthalene having an affinity -7.3 kcal / mol binding value, the khaempferol compound has a higher binding affinity value. The lower the affinity binding value the interaction will be more stable between the ligand with RE α .

Keywords : Binding Affinity, Docking, Khaempferol, Reseptor Estrogen Alfa, RMSD