

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA TURUNAN KURKUMIN (4-
[(1E,6E)-7-(4-HYDROXY-3-METHOXYPHENYL)-3,5-
DIOXOHEPTA-1,6-DIEN-1-YL]-2-METHOXYPHENYL 3-
CHLOROBENZOATE) SEBAGAI KANDIDAT
ANTIKANKER PAYUDARA**

SKRIPSI

**Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana
Farmasi**



AZI ILHAM FIRDAUS

31119048

**PROGRAM STUDI S1-FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
JULI 2024**

ABSTRAK

Studi *In Silico* Senyawa turunan kurkumin (4-[(1E,6E)-7-(4-Hydroxy-3-Methoxyphenyl)-3,5-Dioxohepta-1,6-Dien-1-Yl]-2-Methoxyphenyl 3-Chlorobenzoate) Sebagai Kandidat Antikanker Payudara

Azi Ilham Firdaus

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

ABSTRAK

Kanker adalah penyakit pertumbuhan sel abnormal dalam tubuh manusia yang sering menyerang organ tubuh. Senyawa berbasis alkaloid memiliki aktivitas Antikanker Payudara, seperti Tamoxifen. Penelitian yang akan dilakukan kali ini senyawa turunan kurkumin diuji sebagai kandidat Antikanker Payudara yaitu (4-[(1E,6E)-7-(4-Hydroxy-3-Methoxyphenyl)-3,5-Dioxohepta-1,6-Dien-1-Yl]-2-Methoxyphenyl-3-Chlorobenzoate). Pada penelitian kali ini uji *in silico* dilakukan dalam aktivitas senyawa turunan kurkumin (4-[(1E,6E)-7-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-3,5-dioxohepta-1,6-dien-1-yl]-2-methoxyphenyl-3-Chlorobenzoate), senyawa sintetik dengan kode senyawa 70I sebagai ligan alami, Tamoxifen sebagai obat Antikanker Payudara, dengan reseptor estrogen HER2 (kanker payudara) dengan melihat nilai binding affinity/energi ikatan bebas dan konstanta inhibisi yang merupakan suatu hasil interaksi antara ligan dengan reseptor. Hasil penambatan molekul dapat dilihat menunjukkan afinitas ikatan dari penambatan molekul keempat senyawa, dengan nilai terkecil adalah tamoksifen, kurkumin, 70I, dan senyawa turunan kurkumin dengan masing-masing nilai -8,03 -7,55 -7,15 -7,06 Å. Untuk hasil konstanta inhibisi, hasil penambatan molekul menunjukkan bahwa senyawa turunan kurkumin dapat bersaing dengan ligan. Berdasarkan hasil penelitian penambatan molekul, dapat disimpulkan bahwa afinitas ikatan dari penambatan molekul keempat senyawa, dengan nilai terkecil adalah tamoksifen, kurkumin, 70I, senyawa turunan, Untuk hasil konstanta inhibisi, hasil penambatan molekul menunjukkan bahwa senyawa turunan kurkumin dapat bersaing.

Kata kunci: senyawa turunan; kurkurmin, uji *in silico*, Antikanker Payudara.

ABSTRACT

Cancer is a disease of abnormal cell growth in the human body that often attacks the body's organs. Alkaloid-based compounds have anticancer activity, such as Tamoxifen. The research that will be carried out this time will test curcumin derivative compounds as anticancer candidates, namely (4-[(1E,6E)-7-(4-Hydroxy-3-Methoxyphenyl)-3,5-Dioxohepta-1,6-Dien-1-Yl]-2-Methoxyphenyl-3-Chlorobenzoate). In this research test *in silico* carried out in the activity of curcumin derivative compounds (4-[(1E,6E)-7-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-3,5-dioxo-hepta-1,6-dien-1-yl]-2-methoxyphenyl-3-Chlorobenzoate), synthetic compound with compound code 70I as a natural ligand, Tamoxifen as an anticancer drug, with the estrogen receptor HER2 (breast cancer) by looking at the binding affinity value/free binding energy and inhibition constant which is a result of the interaction between the ligand and the receptor. The results of molecular docking can be seen to show the binding affinity of the molecular docking of the four compounds, with the smallest values being tamoxifen, curcumin, 70I, and curcumin derivative compounds with respective values of -8.03 -7.55 -7.15 -7.06 Å. For the constant results inhibition, the results of molecular docking show that curcumin derivative compounds can compete with ligands. Based on the results of molecular docking research, it can be concluded that the binding affinity of the molecular docking of the four compounds, with the smallest value is tamoxifen, curcumin, 70I, derivative compounds. For the results of the inhibition constant, Molecular docking results show that curcumin derivative compounds can compete.

Keywords: derivative compounds; curcurmin, test *in silico*, anticancer breast.