

PENAMBATAN MOLEKUL DAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL DARI METABOLIT EKSTRAK RUMPUT LAUT COKLAT (*Sargassum Sp.*) TERHADAP RESEPTOR ER- α SEBAGAI KANDIDAT SENYAWA PEMANDU ANTIKANKER PAYUDARA

REGITA RAHMA FISKA
201FF03141

Program Studi S1 Farmasi, Fakultas Farmasi
Universitas Bhakti Kencana

ABSTRAK

Kanker payudara terjadi karena sel kehilangan kontrol sehingga menyebabkan pertumbuhan sel yang tidak normal, cepat, dan tidak terkendali. Pengobatan kanker payudara umumnya diobati dengan proses pembedahan, kemoterapi, terapi radiasi, dan terapi hormonal. Namun metode terapi ini tidak efektif untuk pasien kanker payudara stadium lanjut. Oleh karena itu dibutuhkan target pengobatan yang lebih efektif, salah satu terapi yang dianggap efektif dalam pengobatan kanker payudara adalah dengan menargetkan reseptor estrogen alfa (ER- α). Penggunaan obat kanker dalam jangka waktu yang panjang dapat menimbulkan efek samping yang tidak diinginkan, oleh karena itu dibutuhkan terapi alternatif dengan memanfaatkan bahan alam, salah satunya *Sargassum Sp.* *Sargassum Sp.* mengandung senyawa polisakarida yang dapat digunakan sebagai antikanker, yang mana dapat menghentikan siklus sel dan menghentikan pertumbuhan tumor. Metode yang digunakan yaitu secara komputasi melalui simulasi penambatan molekul menggunakan *Autodock* 4.2.6 dan simulasi dinamika molekul menggunakan *Gromacs*. Hasil simulasi penambatan molekul terhadap 25 senyawa uji, diperoleh 3 senyawa terpilih yaitu Diorecinol, Botrallin, dan Apigenin, dengan nilai ΔG berturut-turut yaitu -9,28; -8,31; dan -8,11 kcal/mol. Simulasi dinamika molekul menunjukkan bahwa nilai RMSD dan RMSF dari ketiga ligan terpilih mampu menstabilkan kompleks. Namun, ligan S23 memiliki nilai MM GBSA total yang paling negatif ($\Delta G = -32,41$ kkal/mol). Disimpulkan apigenin berpotensi untuk menjadi kandidat senyawa pemandu sebagai antikanker payudara.

Kata kunci: Kanker Payudara, Reseptor Estrogen Alpha, *Sargassum Sp.*, Penambatan Molekul, Simulasi Dinamika Molekul

**MOLECULAR DOCKING AND MOLECULAR DYNAMICS
SIMULATION OF METABOLITES EXTRACTED FROM BROWN
SEAWEED (*Sargassum Sp.*) ON ER- α RECEPTORS AS POTENTIAL
BREAST CANCER GUIDING COMPOUNDS**

**REGITA RAHMA FISKA
201FF03141**

Departement of Pharmacy, Faculty of Pharmacy,
Universitas Bhakti Kencana

ABSTRACT

*Breast cancer occurs due to cells losing control, leading to abnormal, rapid, and uncontrolled cell growth. Treatment typically involves surgery, chemotherapy, radiation therapy, and hormonal therapy. However, these methods are often ineffective for advanced breast cancer patients. Therefore, more effective treatment targets are needed, such as targeting the estrogen receptor alpha (ER- α). Long-term use of cancer drugs can cause unwanted side effects, prompting the search for alternative therapies using natural substances, like *Sargassum Sp.* *Sargassum Sp.* contains polysaccharides that exhibit anticancer properties, capable of halting cell cycles and tumor growth. The computational approach involved molecular docking simulations using Autodock 4.2.6 and molecular dynamics simulations using Gromacs. Among 25 tested compounds, three were selected: Diorcinol, Botrallin, and Apigenin, with respective ΔG values of -9.28, -8.31, and -8.11 kcal/mol from molecular docking simulations. Molecular dynamics simulations showed that these ligands stabilized the complexes, with ligand S23 exhibiting the most negative MM GBSA total value ($\Delta G = -32.41$ kcal/mol). In conclusion, apigenin shows potential as a lead compound candidate for breast cancer treatment.*

Key words: Breast Cancer, Estrogen Receptor Alpha, *Sargassum Sp.*, Molecular Docking, Molecular Dynamics Simulation