

ABSTRAK

Kanker payudara menjadi penyakit paling tinggi yang diderita oleh wanita di Indonesia. Overekspresi atau mutasi pada EGFR dapat menyebabkan aktivasi berlebihan yang berkontribusi pada pertumbuhan sel yang tidak terkendali. Pengembangan senyawa antikanker saat ini banyak berasal dari turunan senyawa alami, yang memiliki potensi sebagai *lead compound*. Database Natural Product menjadi salah satu alternatif untuk menemukan senyawa dari alam. Metode virtual screening berbasis farmakofor modelling dan molecular docking menjadi metode yang sangat efektif dan efisien untuk menemukan senyawa secara *in silico*. Penelitian ini melibatkan tahapan preparasi database dan dataset, serta validasi dan simulasi virtual screening. Dari total 151.837 senyawa, setelah divalidasi dengan nilai AUC (Area Under Curve) dan EF (Enrichment Factor), ditemukan 1065 senyawa yang menunjukkan potensi. Hasil validasi molecular docking menunjukkan nilai RMSD (Root Mean Square Deviation) sebesar 0,64 Å. Nilai validasi AUC dan EF pada metode Vina Wizard adalah 0,740 dan 3,5. Melalui virtual screening berbasis molecular docking, berhasil diidentifikasi 30 senyawa herbal dengan nilai energi bebas ikatan yang berpotensi sebagai inhibitor EGFR.

Kata Kunci: EGFR, herbal, kanker payudara, *virtual screening*

ABSTRAK

Breast cancer is the highest disease suffered by women in Indonesia. Overexpression or mutations in EGFR can cause excessive activation that contributes to uncontrolled cell growth. The development of anticancer compounds is currently derived from natural compound derivatives, which have the potential as lead compounds. Natural Product Database is one of the alternatives to find compounds from nature. Virtual screening method based on pharmacophore modelling and molecular docking is a very effective and efficient method to find compounds in silico. This research involves the preparation of databases and datasets, as well as validation and simulation of virtual screening. From a total of 151,837 compounds, after validation with AUC (Area Under Curve) and EF (Enrichment Factor) values, 1065 compounds were found that showed potential. The molecular docking validation results showed an RMSD (Root Mean Square Deviation) value of 0.64 Å. The validation values of AUC and EF in Vina Wizard method were 0.740 and 3.5. Through virtual screening based on molecular docking, 30 herbal compounds with free binding energy were potential successfully identified as EGFR inhibitors.

Keywords: breast cancer, EGFR, hebral, virtual screening