

STUDI *IN-SILICO* FITOKIMIA DARI TUMBUHAN KESUMBA (*BIXA ORELLANA L.*) TERHADAP RESEPTOR VHR SEBAGAI KANDIDAT SENYAWA PEMANDU ANTIKANKER SERVIKS

FERDI JAMAL LINARDO

221FF04031

Program Studi S1 Farmasi, Fakultas Farmasi

Universitas Bhakti Kencana

ABSTRAK

Kanker adalah suatu kondisi dimana sel-sel abnormal tumbuh di luar kendali pada bagian tubuh tertentu dan dapat menyerang jaringan lain sehingga membentuk sel kanker lainnya. Sel kanker bersifat ganas dan bisa menyebabkan kematian. Jenis kanker payudara dan kanker serviks menjadi kematian terbanyak pada wanita di negara maju dan berkembang. Pengobatan kanker serviks yang dilakukan antara lain pembedahan, radioterapi, dan kemoterapi. Berbagai bahan alam dikembangkan sebagai terapi alternatif untuk kanker serviks. Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji potensi senyawa dari Tumbuhan Kesumba (*Bixa Orellana L.*) sebagai anti kanker serviks secara *in silico*. Penelitian ini menggunakan metode *in silico* dengan tahapan, Pengumpulan data senyawa Tumbuhan Kesumba (*Bixa Orellana L.*). Persiapan struktur 3D ligan dan reseptor. Validasi metode penambatan molekul. Penambatan molekul untuk semua senyawa Tumbuhan Kesumba (*Bixa Orellana L.*). Analisis hasil penambatan molekul. Hasil penelitian menunjukkan bahwa 24 dari 51 senyawa Tumbuhan Kesumba (*Bixa Orellana L.*) memenuhi aturan Lipinski's Rule of Five. Senyawa A5 (8-Hydroxyluteolin 7-sulfate) memiliki nilai energi ikat (ΔG) yang paling rendah yaitu -9,98 kkal/mol, menunjukkan interaksi terbaik dengan reseptor VHR dibandingkan senyawa lain dan senyawa pembanding 5-Fluorourasil (-8,75 kkal/mol). Senyawa Tumbuhan Kesumba (*Bixa Orellana L.*), khususnya senyawa A5 (8-Hydroxyluteolin 7-sulfate) & A4 Luteolin 7-sulfate, memiliki potensi sebagai anti kanker serviks berdasarkan hasil *in silico*. Penelitian lebih lanjut diperlukan untuk mengkonfirmasi aktivitas anti kanker serviks senyawa ini secara *in vitro* dan *in vivo*.

Kata Kunci: *Kanker Serviks, Tumbuhan Kesumba (Bixa Orellana L.), In Silico, Anti Kanker, 8-Hydroxyluteolin 7-sulfate*

**IN-SILICO PHYTOCHEMICAL STUDY OF SUMBA PLANTS (BIXA
ORELLANA L.) ON BHR RECEPTORS AS A CANDIDATE FOR
CERVICAL ANTICANCER GUIDING COMPOUNDS**

FERDI JAMAL LINARDO

221FF04031

Department of Pharmacy, Faculty of Pharmacy
Bhakti Kencana University

ABSTRACT

Cancer is a condition where abnormal cells grow uncontrollably in a certain part of the body and can attack other tissues to form other cancer cells. Cancer cells are malignant and can cause death. Breast and cervical cancer are the leading causes of death in women in developed and developing countries. Treatment for cervical cancer includes surgery, radiation therapy, and chemotherapy. Various natural materials are being developed as alternative therapies for cervical cancer. This study aims to investigate the potential of compounds from the Kesumba plant (*Bixa Orellana* L.) as anti-cervical cancer in silico. This study used an *in-silico* method with the following steps: Data collection of Kesumba plant (*Bixa Orellana* L.) compounds. Preparation of 3D ligand and receptor structures. Validation of molecular docking methods. Molecular docking for all Kesumba plant (*Bixa Orellana* L.) compounds. Analysis of molecular docking results. The results showed that 24 of the 51 Kesumba plant (*Bixa Orellana* L.) compounds met Lipinski's Rule of Five. Compound A5 (8-Hydroxyluteolin 7-sulfate) had the lowest binding energy (ΔG) value of -9.98 kcal/mol, indicating the best interaction with the VHR receptor compared to other compounds and the reference compound 5-Fluorouracil (-8.75 kcal/mol). Kesumba plant (*Bixa Orellana* L.) compounds, especially compound A5 (8-Hydroxyluteolin 7-sulfate) & A4 Luteolin 7-sulfate, have the potential as anti-cervical cancer based on in silico results. Further research is needed to confirm the anti-cervical cancer activity of this compound in vitro and in vivo.

Keywords: *Cervical Cancer, Kesumba Plant (Bixa Orellana L.), In Silico, Anti-Cancer, 8-Hydroxyluteolin 7-sulfate*