

**SIMULASI MOLEKULER POTENSI Fisetin SEBAGAI ANTI-
LUMINAL B PADA KANKER PAYUDARA**



PROGRAM SARJANA
DEPARTEMEN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2023

INTISARI

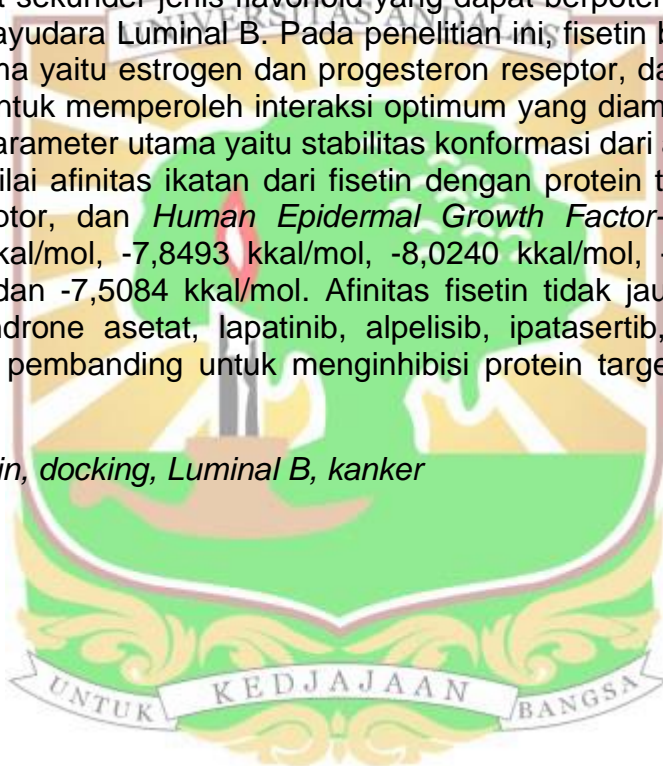
SIMULASI MOLEKULER POTENSI Fisetin SEBAGAI ANTI LUMINAL B PADA KANKER PAYUDARA

Oleh:

Tania Khairunnissa (NIM. 1810412067)
Dr. rer. nat. Syafrizayanti*, Prof. Dr. Mai Efdi*
***Pembimbing**

Kanker payudara merupakan penyakit ganas dan penyebab kematian tertinggi kedua pada perempuan di dunia. Kanker payudara subtipe luminal B merupakan kanker yang agresif yang menyumbang sekitar 40% dari kanker payudara. Fisetin merupakan senyawa metabolit sekunder jenis flavonoid yang dapat berpotensi sebagai inhibitor reseptor kanker payudara Luminal B. Pada penelitian ini, fisetin berinteraksi dengan protein target utama yaitu estrogen dan progesteron reseptor, dan HER2 serta jalur PI3K/Akt/mTOR untuk memperoleh interaksi optimum yang diamati melalui simulasi *docking* dengan parameter utama yaitu stabilitas konformasi dari afinitas ikatan kimia yang terbentuk. Nilai afinitas ikatan dari fisetin dengan protein target estrogen dan progesteron reseptor, dan *Human Epidermal Growth Factor-2*, PI3K/Akt/mTOR adalah -6,3748 kkal/mol, -7,8493 kkal/mol, -8,0240 kkal/mol, -6,8004 kkal/mol, -7,8860 kkal/mol, dan -7,5084 kkal/mol. Afinitas fisetin tidak jauh berbeda dengan estradiol, norethindrone asetat, lapatinib, alpelisib, ipatasertib, dan ridaforolimus sebagai senyawa pembanding untuk menginhibisi protein target kanker payudara Luminal B.

Kata kunci : *Fisetin, docking, Luminal B, kanker*



ABSTRACT

IN SILICO STUDY OF FISETIN AS ANTI- LUMINAL B BREAST CANCER

By:

Tania Khairunnissa (NIM. 1810412067)
Dr. rer. nat. Syafrizayanti*, Prof. Dr. Mai Efdi*
***Supervisor**

Breast cancer is one of the most common types malignancies and is the second leading cause of cancer death in women worldwide. Luminal B subtype is an aggressive cancer accounted nearly 40% of all breast cancer. Fisetin is a secondary metabolite types of flavonoid has shown potential become alternative compound that can be used as inhibitor of Luminal B breast cancer receptors. In this research, fisetin interacted with the main therapeutic targets for breast cancer were estrogen and progesterone receptors, HER2, and PI3K/Akt/mTOR to obtain an optimum interaction with observed parameters through docking, like conformational stability and bond affinity that are formed. The binding affinity of fisetin with target proteins for breast cancer like estrogen and progesterone receptor, and Human Epidermal Growth Factor-2, PI3K/Akt/mTOR were -6,3748 kcal/mol -7,8493 kcal/mol, -8,0240 kcal/mol, -6,8004 kcal/mol, -7,8860 kcal/mol, and -7,5084 kcal/mol. The inhibitory of fisetin is not too much different with estradiol, norethindrone, lapatinib, alpelisib, ipatasertib, and ridaforolimus as inhibitors Luminal B breast cancer.

Keywords :Fisetin, docking, Luminal B, cancer

