

MOLECULAR DOCKING TURUNAN KALKON TERHADAP RESEPTOR ESTROGEN β (ER- β) SEBAGAI ANTIKANKER PAYUDARA

Dwi Koko Pratoko

Dosen Kimia Farmasi Fakultas Farmasi Universitas Jember

Jl. Kalimantan 1 No. 2 Kampus Tegal Boto Jember 68121

Email : dwikoko.farmasi@unej.ac.id

Abstrak

Reseptor estrogen- β (ER- β) merupakan faktor penting dalam penghambatan dan invasi terhadap sel kanker payudara. Reseptor estrogen- β yang terkompleks dengan genistein seringkali dijadikan model target terhadap aksi obat. Penambatan (*docking*) molekul turunan kalkon terhadap Reseptor estrogen- β telah dilakukan untuk menguji energi *docking* dibandingkan dengan afinitas ikatan antara ligan dengan reseptor. Berdasarkan hasil *docking* yang telah dilakukan Kalkon XII memiliki energi *docking* yang paling baik diantara turunan yang lain, sehingga senyawa ini dapat disintesis dan uji *in vitro* aktivitas sitotoksik

Kata kunci : *docking*, kalkon, Reseptor estrogen- β , kanker payudara.

Abstract

Estrogen receptor- β (ER- β) is an important factor to inhibits proliferation and invasion of breast cancer cells. Estrogen receptor- β complexed with genistein is frequently become a role model for the drug action target. Docking molecule derivatives of chalcone on Estrogen receptor- β had been done to test the docking energy associated with binding affinity between ligand and receptor. Based on docking results, Kalkon XII showed to have the best docking energy (MolDockScore). Thus Kalkon can be synthesized and applied for *in vitro* cytotoxic activity.

Keywords : *docking*, chalcone, estrogen receptor- β , breast cancer.

1. PENDAHULUAN

Kanker payudara merupakan suatu penyakit dimana sel-sel ganas terbentuk pada jaringan payudara. Kanker payudara umumnya terjadi pada wanita, lebih dari 100 kali dibandingkan kanker payudara pada pria⁽¹⁾. Insiden kanker payudara di dunia relatif tinggi. Dilaporkan tahun 2008 sebesar 22,9 % dari seluruh keganasan kanker menyerang wanita. Kanker payudara juga menempati urutan pertama penyebab kematian wanita di seluruh dunia dengan angka 13,7 % atau 458.503 kematian dari keseluruhan mortalitas pada wanita di seluruh dunia⁽²⁾.