

INTISARI

SAPUTRA, P.A., 2018, SKRINING TARGET MOLEKULER KANDUNGAN KIMIA RIMPANG KUNYIT PUTIH (*Curcuma zedoaria*) SEBAGAI ANTIKANKER PAYUDARA DENGAN PENDEKATAN BIOINFORMATIKA DAN ANALISIS DOCKING MOLEKULER.

Beberapa penelitian telah membuktikan bahwa ekstrak rimpang kunyit putih (*Curcuma zedoaria*) memiliki aktivitas terhadap sel kanker payudara namun mekanisme kerjanya belum diketahui pasti. Penelitian ini bertujuan untuk memprediksi target molekuler dari kandungan kimia ekstrak rimpang kunyit putih dan prediksi senyawa apa saja yang mampu berinteraksi dengan target molekuler antikanker. Sebanyak sembilan belas struktur senyawa aktif dari kunyit putih yang diidentifikasi dari beberapa literatur dianalisis menggunakan BATMAN-TCM untuk memprediksi protein/gen target. TTD dan OMIM digunakan untuk mengidentifikasi *pathway* dari setiap protein/gen target. Protein target dianalisis lebih lanjut dengan *docking* molekuler menggunakan Autodock vina.

BATMAN-TCM mengidentifikasi enam belas protein/gen target yang diduga terlibat dalam mekanisme kerja masing-masing senyawa. Berdasarkan hasil docking molekuler diprediksi target molekuler potensial dari kandungan ekstrak rimpang kunyit putih adalah PTGS2, ESR1 dan HSP90 dengan senyawa yang diprediksi memiliki interaksi terbaik untuk masing-masing target yaitu, gweicurculactone, alismol, curcumenol, λ -8(17),12diene-15,16dial, neocurdione, zerumbone epoxide, procurcumenol dan zerumin A.

Kata kunci: BATMAN-TCM, kanker payudara, *Curcuma zedoaria*, mekanisme kerja, docking molekuler.

ABSTRACT

SAPUTRA, P.A., 2018, MOLECULAR TARGET SCREENING OF THE CHEMICAL CONSTITUENTS OF CURCUMA ZEDOARIA RHIZOME EXTRACT AS ANTI-BREAST CANCER USING A BIOINFORMATIC AND MOLECULAR DOCKING STUDY

Zedoary (*Curcuma zedoaria*) rhizome extract has been shown to be active against breast cancer cell line in various studies, but its pharmacological mechanism of action remains unclear. This study aimed to predict the molecular target of chemical constituents of zedoary rhizome extract and predict constituents which had good interaction with the anticancer molecular target. Nineteen active compounds of Zedoary rhizome extract which identified from various studies were analyzed using BATMAN-TCM to predict target proteins/genes. TTD and OMIM were used to identified pathways of target proteins/genes. Predicted target proteins were further analyzed with molecular docking using systemsDock followed by Autodock Vina.

BATMAN-TCM identified sixteen target proteins/genes were involved in the mechanism of action of tested structures. The primary potential target molecular targets of zedoary constituents were PTGS2, ESR1, and HSP90 with potential active constituents were Gweicurculactone, Alismol, Curcumenol, λ -8(17),12diene-15,16dial, Neocurdione, Zerumbone epoxide, Procurcumenol dan Zerumin A.

Keywords: BATMAN-TCM, Breast Cancer, *Curcuma zedoaria*, Mechanism of action, Molecular docking.