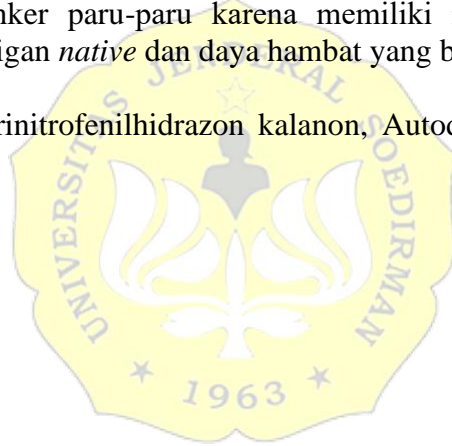


ABSTRAK

Kanker payudara dan kanker paru-paru adalah penyakit mematikan dan paling banyak diderita oleh masyarakat umum. Penelitian ini bertujuan untuk melihat interaksi 2,4,6-Trinitrofenilkalanon sebagai ligan dengan protein her- α dan EGFR sebagai reseptor menggunakan program Autodock Vina, divisualisasikan dengan BIOVIA Discovery Studio dan Pymol. Hasilnya menunjukkan bahwa nilai ΔG untuk ligan *native* pada protein kanker payudara dan paru-paru sebesar -9,9 kkal/mol dan -9,0 kkal/mol dan untuk ligan 2,4,6-trinitrofenilhidrazon kаланon pada payudara dan paru-paru sebesar -7,7 kkal/mol dan -9,9 kkal/mol. Nilai konstanta inhibisi untuk ligan *native* pada protein kanker payudara dan paru-paru sebesar $-5,52 \times 10^{-2} \mu\text{M}$ dan $2,52 \times 10^{-1} \mu\text{M}$ dan untuk ligan 2,4,6-trinitrofenilhidrazon kаланon pada payudara dan paru-paru sebesar $2,26 \mu\text{M}$ dan $5,52 \times 10^{-2} \mu\text{M}$. Sehingga dapat disimpulkan bahwa senyawa 2,4,6-Trinitrofenilhidrazon kаланon tidak berpotensi sebagai obat anti kanker payudara karena memiliki nilai ΔG kurang negatif dibandingkan dengan ligan *native* dan daya hambat yang kecil, namun berpotensi sebagai obat anti kanker paru-paru karena memiliki nilai ΔG lebih negatif dibandingkan dengan ligan *native* dan daya hambat yang besar.

Kata kunci : 2,4,6-Trinitrofenilhidrazon kаланon, Autodock Vina, Penambatan Molekul



ABSTRACT

Breast cancer and lung cancer are deadly diseases and are the most common among the general public. This study aims to observe the interaction of 2,4,6-Trinitrophenylkalanon as a ligand with her-a protein and EGFR as a receptor using the Autodock Vina program, visualized with BIOVIA Discovery Studio and Pymol. The results showed that the ΔG values for native ligands in breast and lung cancer proteins were -9.9 kcal/mol and -9.0 kcal/mol and for 2,4,6-trinitrophenylhydrazone kalanon in breast and lung were -7.7 kcal/mol and -9.9 kcal/mol. The inhibition constants for native ligands in breast and lung cancer proteins were $-5.52 \times 10^{-2} \mu\text{M}$ and $2.52 \times 10^{-1} \mu\text{M}$ and for 2,4,6-trinitrophenylhydrazone kalanon in breast and lung were $2.26 \mu\text{M}$ and $5.52 \times 10^{-2} \mu\text{M}$. So it can be concluded that the compound 2,4,6-trinitrophenylhydrazone kalanon had no potential as an anti-breast cancer drug because it had a less negative ΔG value compared to the native ligand and had low inhibitory power, but had the potential as an anti-lung cancer drug because it had a ΔG value is more negative than the native ligand and it had high inhibitory power.

Keywords : 2,4,6-Trinitrophenylhydrazone calanone, Autodock Vina, molecular docking

