

ABSTRAK

Kanker payudara merupakan tumor yang paling ganas dan telah menjadi isu penyakit global. Metode pengobatan kanker payudara yang ada saat ini seperti antibodi monoklonal menimbulkan efek samping pada pasien dan timbulnya resistensi di beberapa kasus sehingga diperlukan eksplorasi pengobatan yang tidak menimbulkan efek samping dan minim resistensi. Kacang tunggak (*Vigna unguiculata L. Walp*) melalui proses hidrolisis enzimatis menghasilkan protein yang berperan sebagai peptida bioaktif dan dilaporkan memiliki sifat sebagai peptida antikanker terhadap sel MCF-7. Penelitian ini bertujuan untuk menambatkan molekul peptida kacang tunggak terhadap reseptor HER2 (ID PDB: 3PP0) secara *in silico* menggunakan penambatan molekul sehingga diketahui aktivitasnya sebagai inhibitor kanker payudara berdasarkan parameter berupa nilai afinitas ikatan dan interaksi yang terbentuk, seperti ikatan hidrogen dan interaksi hidrofobik. Hasil penambatan molekul peptida menggunakan HADDOCK 2.4 menunjukkan peptida EQQQQQEESWEVQR (P7) membentuk pengikatan yang stabil dengan reseptor HER2 dengan afinitas ikatan -11.6 kkal/mol dan membentuk ikatan hidrogen pada asam amino Cys805, Arg849 sebanyak 3 ikatan, Ser728, Gly732, Arg897, Gly882, Phe731, Ala730, dan Val884 dengan panjang ikatan berkisar 2.63–3.15 Å serta distabilkan oleh 15 interaksi hidrofobik. Adapun penambatan menggunakan CABS-dock menghasilkan peptida EQQQQQEESWEVQR (P7) membentuk ikatan paling stabil dengan reseptor HER2 dengan nilai afinitas ikatan sebesar -11.3 kkal/mol. Interaksi spesifik yang dihasilkan berupa ikatan hidrogen pada residu Lys736, Ser1007, Lys921, Glu914 pada panjang ikatan 2.73–3.35 Å dan 16 interaksi hidrofobik.

Kata kunci: kacang tunggak, antikanker, penambatan molekul, HADDOCK 2.4, CABS-dock

ABSTRACT

*Breast cancer is the most aggressive tumor and has become a global health issue. Current breast cancer treatment methods, such as monoclonal antibodies, have side effects on patients and resistance has developed in some cases, necessitating the exploration of treatments that do not cause side effects and have minimal resistance. Cowpea (*Vigna unguiculata* L.Walp) through enzymatic hydrolysis produces proteins that act as bioactive peptides and have been reported to have anticancer peptide properties against MCF-7 cells. This study aims to dock cowpea peptide molecules to the HER2 receptor (PDB ID: 3PP0) in silico by molecular docking, to determine their activity as breast cancer inhibitors based on parameters such as binding affinity values and formed interactions, such as hydrogen bonds and hydrophobic interactions. The results of peptide docking using HADDOCK 2.4 show that the peptide EQQQQQQEESWEVQR (P7) forms a stable binding with the HER2 receptor with a binding affinity of -11.6 kcal/mol and establishes hydrogen bonds with the amino acids Cys805, Arg849 (three bonds), Ser728, Gly732, Arg897, Gly882, Phe731, Ala730, and Val884 with bond lengths ranging from 2.63 to 3.15 Å, and is stabilized by 15 hydrophobic interactions. Meanwhile, docking using CABS-dock results in the peptide EQQQQQQEESWEVQR (P7) forming the most stable bond with the HER2 receptor with a binding affinity value of -11.3 kcal/mol. The specific interactions produced include hydrogen bonds with residues Lys736, Ser1007, Lys921, Glu914 at bond lengths of 2.73 to 3.35 Å and 16 hydrophobic interactions.*

Keywords: cowpea, anticancer, molecular docking, HADDOCK 2.4, CABS-dock