

ABSTRAK

INNA NUR HASANAH, 2025. ANALISIS PENAMBATAN MOLEKULER SENYAWA AKTIF JAHE (*Zingiber Officinale*) TERHADAP PROTEIN TARGET SEBAGAI ANTIKANKER HATI, SKRIPSI, PROGRAM STUDI S1 FARMASI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA, Dibimbing oleh Dr. apt. Rina Herowati, M.Si. dan apt. Fransiska Leviana, S.Farm., M.Sc

Kanker hati merupakan salah satu penyakit dengan tingkat kematian tinggi di dunia, yang berkaitan dengan disregulasi jalur apoptosis dan proliferasi sel. Protein BCL-XL dan *extracellular signal-regulated kinase 1/2* (ERK1/2) diketahui berperan penting dalam menghambat kematian sel dan mendukung pertumbuhan sel kanker. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi senyawa aktif dari tanaman jahe (*Zingiber officinale*) sebagai kandidat inhibitor alami terhadap protein BCL-XL dan ERK1/2 melalui pendekatan penambatan molekuler.

Metode yang digunakan adalah penambatan molekuler (*molecular docking*) terhadap protein BCL-XL (kode PDB: 4QVX) dan ERK1/2 (kode PDB: 2OJJ) menggunakan perangkat lunak AutodockVina. Penilaian dilakukan berdasarkan nilai energi ikatan (*binding affinity*) dan kesamaan pola interaksi dengan ligan asli, terutama pada residu-residu penting dalam situs aktif protein.

Hasil menunjukkan bahwa senyawa rutin, quercetin, naringenin, apigenin, luteolin, catechin, epicatechin, β -eudesmol, dan α -eudesmol memiliki nilai energi ikatan yang baik terhadap kedua protein target. Beberapa senyawa juga menunjukkan kemiripan interaksi residu yang tinggi, seperti quercetin terhadap ERK1/2 (70%) dan epicatechin terhadap BCL-XL (53%), yang mengindikasikan potensi senyawa tersebut dalam meniru kerja ligan asli dan menghambat aktivitas protein target secara kompetitif.

Kata kunci: kanker hati, jahe, penambatan molekuler, BCL-XL, ERK1/2

ABSTRACT

INNA NUR HASANAH, 2025. MOLECULAR DOCKING ANALYSIS OF ACTIVE COMPOUNDS FROM GINGER (*Zingiber officinale*) AGAINST TARGET PROTEINS AS HEPATOCELLULAR CARCINOMA AGENTS. PROGRAM STUDI S1 FARMASI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA, Dibimbing oleh Dr. apt. Rina Herowati, M.Si. dan apt. Fransiska Leviana, S.Farm., M.Sc

Hepatocellular carcinoma (HCC) is the most common primary liver cancer and a major cause of cancer-related death worldwide. The proteins BCL-XL and ERK1/2 play critical roles in inhibiting apoptosis and promoting cancer cell proliferation, making them key targets in the development of anticancer therapies. This study aimed to evaluate the potential of active compounds from ginger (*Zingiber officinale*) as natural inhibitors of BCL-XL and ERK1/2 using a molecular docking approach.

The method involved molecular docking simulations against BCL-XL (PDB ID: 4QVX) and ERK1/2 (PDB ID: 2OJJ) using AutoDockVina software. Evaluation was based on binding energy values and the similarity of amino acid interaction patterns between the test compounds and the native ligands.

The results showed that rutin, quercetin, naringenin, apigenin, luteolin, catechin, epicatechin, β -eudesmol, and α -eudesmol had favorable binding energies toward both protein targets. Several compounds also exhibited high interaction similarity, such as quercetin with ERK1/2 (70%) and epicatechin with BCL-XL (53%), indicating their potential to mimic native ligand binding and competitively inhibit the activity of the target proteins.

Keywords: ginger, liver cancer, BCL-XL, ERK1/2, molecular docking