



**KEMENTERIAN PENDIDIKAN DAN KEBUDAYAAN  
UNIVERSITAS NEGERI GORONTALO  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
JURUSAN KIMIA  
PROGRAM STUDI KIMIA**

Jalan Prof. Dr. Ing. BJ. Habibie, Kabupaten Bone Bolango, 96119  
Telepon (0435) 827213 Fax. (04235) 827213

---

**SURAT PERNYATAAN**

Yang bertanda tangan dibawah ini :

Nama : Zikran Abdullah

NIM : 442 417 028

Dengan ini saya menyatakan dengan sesungguhnya dan sebenar-benarnya bahwa skripsi yang berjudul **“Studi Interaksi Senyawa 3-hydroxylup-20(29)-en Turunan Triterpenoid Terhadap Reseptor Estrogen- $\alpha$  Sebagai Kandidat Antikanker”** benar-benar seluruhnya merupakan karya tulis saya sendiri yang dibuat untuk memenuhi salah satu syarat dalam memperoleh gelar Sarjana Sains di Universitas Negeri Gorontalo.

Adapun bagian-bagian tertentu dalam penulisan skripsi ini telah dituliskan sumbernya secara jelas dan sesuai dengan kaidah, aturan, dan etika penulisan karya tulis ilmiah Universitas Negeri Gorontalo.

Apabila dikemudian hari ditemukan sebagian atau seluruh skripsi ini bukan hasil karya saya sendiri atau terdapat plagiat dalam bagian-bagian tertentu, maka saya bersedia menerima sanksi pencabutan gelar akademik yang saya sandang dan sanksi lainnya sesuai peraturan Perundang-undangan yang berlaku.

Gorontalo, Januari 2022

**Zikran Abdullah**  
NIM 442 417 028

**LEMBAR PERSETUJUAN PEMBIMBING**

Skripsi yang berjudul:

**STUDI INTERAKSI SENYAWA 3-HYDROXYLUP-20(29)-EN TURUNAN  
TRITERPENOID TERHADAP RESEPTOR ESTROGEN- $\alpha$  SEBAGAI  
KANDIDAT ANTIKANKER**

Oleh

Zikran Abdullah  
NIM. 442 417 028

**Telah Diperiksa dan Disetujui Oleh**

**Pembimbing I**



Dr. Yuszda K. Salimi, M. Si  
NIP. 19710323 199802 2 009

**Pembimbing II**



Dr. Netty Ino Ishak, M. Kes  
NIP. 19680223 199303 2 001

**Mengetahui**

**Ketua Jurusan Kimia**



Wiwin Rewini Kunusa, S.Pd, M.Si  
NIP 197001108 200112 2 001

**LEMBAR PENGESAHAN**

Skripsi yang berjudul:

**STUDI INTERAKSI SENYAWA 3-HYDROXYLUP-20(29)-EN TURUNAN  
TRITERPENOID TERHADAP RESEPTOR ESTROGEN- $\alpha$  SEBAGAI  
KANDIDAT ANTIKANKER**

Oleh

Zikran Abdullah

NIM 442 417 028

**Telah Dipertahankan di Depan Dewan Penguji**

Hari/Tanggal : Kamis, 06 Januari 2022

Waktu : 09.00 – 10.30 WITA

**Penguji :**

- 1) **Dr. Akram La Kilo, M.Si**  
NIP 19770411 200312 1 001
- 2) **Dr. La Ode Aman, M.Si**  
NIP 19770421 200604 1 002
- 3) **La Alio, S.Pd., M.Si**  
NIP 19750427 200212 1 002
- 4) **Dr. Yuszda K. Salimi, M.Si**  
NIP 19710323 199802 2 009
- 5) **Dr. Netty Ino Ischak, M.Si**  
NIP 19680223 199303 2 001

1. 
2. 
3. 
4. 
5. 

**Mengetahui,  
Dekan Fakultas Matematika dan IPA**

  
**Prof. Dr. Astin Lukum, M.Si**  
NIP.19630327 198803 2 002

## ABSTRAK

**Zikran Abdullah, 2022.** “Studi Interaksi Senyawa *3-hydroxylup-20(29)-en* Turunan Triterpenoid terhadap Reseptor Estrogen- $\alpha$  sebagai Kandidat Antikanker”. Program Studi S-1 Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Gorontalo. pembimbing I Dr. Yuszda K. Salimi, M.Si. dan Pembimbing II Dr. Netty Ino Ischak, M.Kes.

Senyawa *3-hydroxylup-20(29)-en* merupakan senyawa golongan triterpenoid yang diketahui memiliki aktivitas antikanker. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mempelajari interaksi senyawa *3-hydroxylup-20(29)-en* dengan *Esterogen Receptor- $\alpha$*  (*ER- $\alpha$* ) yang merupakan protein yang terkait dengan sel kanker payudara. Interaksi ligan dengan *Esterogen Receptor- $\alpha$*  dipelajari dengan menerapkan metode *Molecular Docking* dan *Molecular Dynamic*. Hasil validasi situs ikatan dengan menerapkan protokol penambatan ulang (*redocking*) menunjukkan nilai *Root Mean Square Deviation* konformasi ligan standar *N-[(1R)-3-(4-hydroxyphenyl)-1-methylpropyl]-2-[2-phenyl-6-(2-piperidin-1-ylethoxy)-1H-indol-3-yl]acetamide* sebesar 0.998 Å dan nilai energi bebas ikatan yang terbentuk sebesar -11,8 kkal/mol. Hasil energi bebas ikatan ligan uji *3-hydroxylup-20(29)-en* sebesar -9,7 kkal/mol. Hasil analisis *Molecular Dynamic* menggunakan *MMGBSA* dengan nilai energi bebas ikatan untuk ligan standar sebesar -49,5 kkal/mol dan ligan uji sebesar -27,1 kkal/mol. Interaksi residu aktif *Esterogen Receptor- $\alpha$*  pada *3-hydroxylup-20(29)-en* dengan kontribusi terbesar terdapat pada residu *Leu 346*, *Met 388* dan *Met 421* dengan energi ikatan sebesar  $-5 \pm 1$  kkal/mol dan kontribusi terbesar ligan standar terdapat pada residu *Glu 353* dengan nilai energi sebesar  $-10 \pm 10$  kkal/mol, di susul dengan residu *Thr 347*, *Ala 350* dan *Leu 525* dengan energi sebesar  $-5 \pm 1$  kkal/mol. Hasil *Molecular Dynamic* menunjukkan bahwa energi ikatan yang terbentuk lebih kecil dibandingkan dengan hasil *Molecular Docking*. Hal ini menunjukkan metode *Molecular Dynamic* mampu mengoptimalkan interaksi antara protein *Esterogen Receptor- $\alpha$*  dengan *3-hydroxylup-20(29)-en* dan memiliki potensi sebagai inhibitor terhadap sel kanker payudara *ER+*.

Kata Kunci: *Molecular Docking*, *Molecular Dynamic*, Estrogen reseptor- $\alpha$ , *3-hydroxylup-20(29)-en*, antikanker

## ABSTRACT

**Zikran Abdullah, 2022.** “Study of Interaction of *3-hydroxylup-20(29)-en* Triterpenoid Derivatives on Estrogen Receptor- $\alpha$  as Anticancer Candidate”. Bachelor’s Degree Program in Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Science, State University of Gorontalo. The Principal Supervisor is Dr. Yuszda K. Salimi, M.Si., and the Co-supervisor is Dr. Netty Ino Ischak, M.Kes.

The *3-hydroxylup-20(29)-en* is a triterpenoid compound known to have anticancer activity. This research aims to study the interaction of *3-hydroxylup-20(29)-en* compound with Estrogen Receptor- $\alpha$  (ER- $\alpha$ ), which is a protein associated with breast cancer cells. The interaction of the ligand with Estrogen Receptor-  $\alpha$  is studied by applying the Molecular Docking and Molecular Dynamic methods. The results of the validation of the binding site by applying the re-docking protocol show the Root Mean Square Deviation value of the standard ligand conformation *N-[(1R)-3-(4-hydroxyphenyl)-1-methylpropyl]2-[2-phenyl-6-(2-piperidine-1-ylethoxy)-1H-indole-3-yl]acetamide* is 0.998 Å and the binding-free energy value formed is -11.8 kcal/mol. The result of the binding-free energy for test ligand on the *3-hydroxylup-20(29)-en* is -9.7 kcal/mol. The result of Molecular Dynamic analysis using MMGBSA with a binding-free energy value for the standard ligand is -49.5 kcal/mol, and the test ligand is -27.1 kcal/mol. The interaction of active residues of Estrogen Receptor-  $\alpha$  at *3-hydroxylup-20(29)-en* with the largest contribution is found in residues of Leu 346, Met 388, and Met 421 with a binding energy of  $-5 \pm 1$  kcal/mol. Also, the largest contribution of standard ligand is found in residues of Glu 353 with energy values of  $-10 \pm 10$  kcal/mol, followed by residues of Thr 347, Ala 350, and Leu 525 with energy value of  $-5 \pm 1$  kcal/mol. The result of Molecular Dynamic shows that the binding energy formed is smaller than the result of Molecular Docking. This shows that the Molecular Dynamic method is able to optimize the interaction between Estrogen Receptor-  $\alpha$  protein and *3-hydroxylup-20(29)-en* and has potential as an inhibitor against *ER+* breast cancer cells.

**Keywords:** Molecular Docking, Molecular Dynamic, Estrogen Receptor-  $\alpha$ , *3-hydroxylup-20(29)-en*, anticancer

