

## **SINTESIS 2',4'-DIHIDROKSI-4-METOKSIKALKON DAN UJI POTENSINYA SEBAGAI ANTIKANKER DENGAN METODE PENAMBATAN MOLEKUL**

ANISYAH PUTRI  
17/412661/PA/17980

### **INTISARI**

Telah dilakukan penelitian mengenai sintesis 2',4'-dihidroksi-4-metoksikalkon untuk mengetahui potensinya sebagai antikanker payudara. Tahap sintesis senyawa 2',4'-dihidroksi-4-metoksikalkon melalui reaksi kondensasi Claisen-Schmidt dengan bahan dasar 2,4-dihidroksiasetofenon dan 4-metoksikalkon menggunakan katalis basa NaOH 40%. Reaksi dilakukan dengan pengadukan pada suhu kamar selama 24 jam. Senyawa hasil sintesis dikarakterisasi dan dilakukan identifikasi dengan spektrometer FTIR dan GC-MS. Senyawa 2',4'-dihidroksi-4-metoksikalkon diuji potensinya sebagai antikanker menggunakan metode penambatan molekul. Senyawa kalkon sebagai ligan usulan dilakukan penambatan molekul terhadap reseptor protein EGFR (PDB ID: 3W2S) menggunakan perangkat lunak AutoDock Tools 1.4.7 dan visualisasi interaksi menggunakan aplikasi Discovery Studio 2017.

Senyawa 2',4'-dihidroksi-4-metoksikalkon telah berhasil disintesis dengan persentase hasil sebesar 44,4% (b/b), berbentuk padatan berwarna kuning dengan titik lebur 167-170 °C. Hasil penambatan molekul senyawa 2',4'-dihidroksi-4-metoksikalkon terhadap reseptor protein EGFR (PDB ID: 3W2S) menunjukkan bahwa senyawa ligan usulan memiliki potensi sebagai senyawa penghambat antikanker terhadap protein EGFR, ditandai dengan interaksi ikatan hidrogen yang terjadi antara residu asam amino reseptor EGFR Phe856 dengan jarak ikatan 1,86 Å, dan interaksi ikatan van der Waals terhadap residu asam amino Leu747, Leu862, Met766, nilai konstanta inhibisi hasil penambatan molekul yang kecil yaitu sebesar 11,52 µM, serta nilai energi bebas yang bernilai negatif yaitu sebesar -6,74 kkal mol<sup>-1</sup> yang menandakan bahwa interaksi antara ligan dan reseptor EGFR terjadi secara spontan.

Kata kunci: antikanker, EGFR, kalkon, penambatan molekul.

## **SYNTHESIS OF 2',4'-DIHYDROXY-4-METHOXYCHALCONE AND ITS POTENTIAL AS AN ANTICANCER AGENT USING MOLECULAR DOCKING METHOD**

ANISYAH PUTRI  
17/412661/PA/17980

### **ABSTRACT**

Synthesis of 2',4'-dihydroxy-4-methoxychalcone and its potential as a breast cancer anticancer agent has been carried out. The synthesis stage of 2',4'-dihydroxy-4-methoxychalcone involved a Claisen-Schmidt condensation reaction using 2,4-dihydroxyacetophenone and 4-methoxybenzaldehyde with a 40% NaOH base catalyst. The reaction was stirred at room temperature for 24 hours. The synthesized compound was characterized and identified using FTIR and GC-MS spectrometers. The anticancer potential of 2',4'-dihydroxy-4-methoxychalcone was tested using the molecular docking method. The chalcone compound, as the proposed ligand, was docked against the EGFR protein receptor (PDB ID: 3W2S) using AutoDock Tools 1.4.7 software and the interaction visualization was performed using Discovery Studio 2017.

The 2',4'-dihydroxy-4-methoxychalcone compound was successfully synthesized with a yield of 44.4% (w/w), appearing as a yellow solid with a melting point of 167-170 °C. Molecular docking results of 2',4'-dihydroxy-4-methoxychalcone to the EGFR protein receptor (PDB ID: 3W2S) indicated that the proposed ligand has the potential as an anticancer inhibitor for the EGFR protein, characterized by bond interactions with the EGFR receptor amino acid residue Phe856 at a bond distance of 1.86 Å, and van der Waals interactions with amino acid residues Leu747, Leu862, Met766. The molecular docking results also showed a small inhibition constant of 11.52 µM and a negative free energy value of -6.74 kcal mol<sup>-1</sup>, indicating that the interaction between the ligand and the EGFR receptor occurs spontaneously.

**Keywords:** anticancer, chalcone, EGFR, molecular docking