

## INTISARI

*Curcuma mangga* Val. merupakan tanaman yang memiliki potensi sebagai antikanker payudara. Rimpang *C. mangga* Val. banyak digunakan oleh masyarakat Yogyakarta dan sekitarnya sebagai herbal antikanker payudara. Uji sitotoksik minyak atsiri rimpang *C. mangga* Val. menunjukkan aktivitas sitotoksik pada sel kanker payudara T47D dan MCF7. Adanya potensi *C. mangga* Val. sebagai antikanker payudara memungkinkan terjadinya pemalsuan minyak atsiri *C. mangga* Val. dengan mencampurkan minyak lain ke dalamnya. Penelitian ini bertujuan untuk autentikasi minyak atsiri rimpang *C. mangga* Val. dan identifikasi zat aktif dari minyak atsiri rimpang *C. mangga* Val. yang berpotensi antikanker payudara secara *molecular docking*.

Penelitian ini terdiri dari beberapa tahap yaitu isolasi minyak atsiri *C. mangga* Val. menggunakan destilasi uap air, karakterisasi berupa organoleptis dan bobot jenis, autentikasi dengan metode kombinasi spektroskopi IR dan kemometrika, identifikasi kandungan senyawa aktif minyak atsiri *C. mangga* Val. menggunakan GCMS, serta studi *molecular docking* menggunakan *software* MOE ligan senyawa aktif minyak atsiri *C. mangga* Val. terhadap protein target ER $\alpha$  (menggunakan 3ERT), PR (2W8Y) dan Aromatase (3S7S) dengan ligan referensi berturut-turut: 4-Hidroksi tamoksifen, progesteron dan exemestan.

Destilasi uap air rimpang *C. mangga* Val. dihasilkan minyak atsiri dengan rendemen 0,14% dari simplisia kering dan 0,09% dari simplisia segar. Minyak atsiri yang dihasilkan berwarna kuning dengan BJ 0,953 g/mL. Hasil autentikasi campuran biner antara MAKM dan minyak kemiri menunjukkan bahwa bilangan gelombang 1614-1068 cm<sup>-1</sup> dengan spektra normal memberikan nilai R<sup>2</sup> tertinggi 0,9999 serta RMSEC dan RMSEP terendah 0,485% dan 0,451%. Kombinasi spektroskopi FTIR dan PLSR pada bilangan gelombang 1614-1068 cm<sup>-1</sup> merupakan teknik yang akurat untuk menentukan adanya campuran minyak kemiri dalam MAKM. Hasil *molecular docking* menunjukkan beberapa senyawa yang terkandung dalam minyak atsiri rimpang *C. mangga* Val. dapat menghambat proliferasi sel kanker payudara melalui penghambatan protein reseptor ER $\alpha$  dan PR; tetapi tidak menghambat Aromatase. Senyawa tersebut adalah *cis-Nerolidol* (*binding potency* 108,17%),  $\beta$ -Bisabolene (104%) dan  $\beta$ -Farnesene (102,45%) untuk reseptor ER $\alpha$ ; *cis-Nerolidol* (109,54%) untuk reseptor PR. Sedangkan *binding potency* ligan senyawa aktif minyak atsiri rimpang *C. mangga* Val. (*cis-Nerolidol*) pada reseptor Aromatase hanya 89,27%; sehingga potensinya sebagai inhibitor reseptor aromatase kurang kuat.

**Kata Kunci:** Minyak atsiri *Curcuma mangga* Val., Autentikasi, *Molecular Docking*, Jalur Luminal, *cis-Nerolidol*.

## ABSTRACT

*Curcuma mangga* Val. is a plant that has potential as a breast anticancer. *C. mangga* Val. rhizome is widely used by people in Yogyakarta and its surroundings as a breast anticancer herbal. In vitro cytotoxic test of the essential oil of *C. mangga* Val. is showing cytotoxic activity on T47D and MCF7 breast cancer cells. The potential of *C. mangga* Val. as a breast anticancer allows adulteration of *C. mangga* Val. essential oil by mixing other oils into it. This study aims to authenticate the essential oil of *C. mangga* Val. rhizome and identification of active substances from the essential oil of *C. mangga* Val. rhizome as breast anticancer breast by molecular docking.

This study consisted of several stages, namely the isolation of *C. mangga* Val essential oil. using water vapor distillation, characterization in the form of organoleptic and specific gravity, authentication using a combination method of IR spectroscopy and chemometrics, identification of the active compound content of the essential oil of *C. mangga* Val. using GCMS, as well as molecular docking studies using MOE software ligand active compound of *C. mangga* Val. essential oil against the target protein ER $\alpha$  (using 3ERT), PR (2W8Y), and Aromatase Inhibitor (3S7S) with reference ligands respectively: 4-hydroxy tamoxifen, progesterone, and exemestan.

Water vapor distillation the rhizomes of *C. mangga* Val. produced essential oil with a yield of 0,14% from dry simplicia and 0,09% from wet simplicia. The resulting essential oil is yellow with a specific gravity 0,953 g/mL. The authentication results of MAKM and hazelnut oil mixture showed that the wave number 1614-1068  $\text{cm}^{-1}$  had the highest R2 value of 0,9999 and the lowest percentage of RMSEC 0,485% and RMSEP 0,451%. FTIR combined with PLSR at wave number 1614-1068  $\text{cm}^{-1}$  is an accurate technique to determine the presence of hazelnut oil mixture in MAKM. The molecular docking results showed several compounds contained in the essential oil of *C. mangga* Val. can inhibit breast cancer cell proliferation through inhibition of ER $\alpha$  and PR receptor proteins, but does not inhibit Aromatase Inhibitor. Because the binding potential of these compounds is above 100% compared to the negative ligands. These compounds are *cis*-Nerolidol (binding potency 108,17%),  $\beta$ -Bisabolene (104%), and  $\beta$ -Farnesene (102,45%) for ER $\alpha$ , *cis*-Nerolidol receptors (109,54%) for PR receptors. While binding potency of ligands is the active compound of the essential oil of *C. mangga* Val. (*cis*-Nerolidol) on Aromatase receptors only 89,27%; so that its potential as an aromatase receptor inhibitor is less strong.

**Keywords:** *Curcuma mangga* Val., Essential oil, Authentication, Molecular Docking, Luminal, *cis*-Nerolidol