

**POTENSI SENYAWA TURUNAN ALKALOID SEBAGAI
KANDIDAT ANTIKANKER PAYUDARA: STUDI *IN SILICO***

SKRIPSI



**SEDIN RENADI
31119077**

**PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
JUNI 2023**

ABSTRAK

Potensi Senyawa Turunan Alkaloid Sebagai Kandidat Antikanker Payudara: Studi *In Silico*

Sedin Renadi

Program Studi Farmasi, Fakultas Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Abstrak

Kanker payudara merupakan penyakit kanker paling umum untuk wanita di dunia. Salah satu reseptor target untuk pengobatan kanker payudara adalah reseptor estrogen, progesteron, dan HER2. Telah dikembangkan alternatif pengobatan melalui bahan alam dan salah satunya adalah senyawa alkaloid. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui aktivitas senyawa alkaloid sebagai antikanker payudara melalui metode *in silico*. Dilakukan virtual skrining (AutoDock Vina), penambatan molekul (AutoDock Tools), dinamika molekul (Desmond), pemindaian aturan lima Lipinski serta parameter farmakokinetik dan toksisitas. Hasil penambatan molekul dan dinamika molekul memperlihatkan senyawa daurisoline, solasodine, dan sambutoxin memiliki interaksi stabil dengan reseptor HER2 dengan nilai *root mean square deviation* RMSD dan *root-mean square fluctuation* RMSF paling rendah dibandingkan dengan senyawa lain. Berdasarkan hasil studi yang dilakukan menunjukkan bahwa daurisoline, solasodine, dan sambutoxin dapat digunakan sebagai kandidat anti-HER2 untuk pengobatan kanker payudara.

Kata Kunci: alkaloid, dinamika molekul, kanker payudara, penambatan molekul, skrining virtual

Abstract

Breast cancer is the most common cancer for women in the world. One of the target receptors for the treatment of breast cancer are estrogen, progesterone and HER2 receptors. An alternative treatment using natural ingredients has been developed, one of which is alkaloid compounds. This study aims to determine the activity of alkaloid compounds as anti-breast cancer through *in silico* method. Virtual screening (AutoDock Vina), molecular docking (AutoDock Tools), molecular dynamics (Desmond), scanning Lipinski's rule of five as well as pharmacokinetic and toxicity parameters were performed. The results of molecular docking and molecular dynamics show that the compounds Daurisoline, Solasodine and Sambutoxin have stable interactions with the HER2 receptor with the lowest root mean square deviation (RMSD) and root-mean square fluctuation (RMSF) compared to other compounds. Based on the results of the study conducted, it was shown that Daurisoline, Solasodine, and Sambutoxin can be used as anti-HER2 candidates for the treatment of breast cancer.

Keywords: alkaloid, breast cancer, molecular docking, molecular dynamic, virtual screening