

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM BUAH  
MAHKOTA DEWA (*Phaleria macrocarpa*) SEBAGAI ANTIKANKER  
PAYUDARA**

**SKRIPSI**

**Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana**



**AI PUTRI LESTARI**

**31119166**

**PROGRAM STUDI SI FARMASI**

**FAKULAS FARMASI**

**UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA**

**2023**

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM BUAH  
MAHKOTA DEWA (*Phaleria macrocarpa*) SEBAGAI ANTIKANKER  
PAYUDARA**

**SKRIPSI**

**Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana**



**AI PUTRI LESTARI**

**31119166**

**PROGRAM STUDI SI FARMASI**

**FAKULAS FARMASI**

**UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA**

**2023**

## ABSTRAK

### STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM BUAH MAHKOTA DEWA (*Phaleria macrocarpa*) SEBAGAI ANTIKANKER PAYUDARA

Ai Putri Lestari

S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

#### Abstrak

Kanker payudara merupakan penyebab tertinggi kematian akibat kanker pada wanita, angka kejadian kanker payudara di Indonesia meningkat pada tahun 2018 dari 1,4/1000 penduduk menjadi 1,79/1000 penduduk. Pengujian aktivitas anti kanker payudara dari senyawa yang terkandung dalam buah mahkota dewa (*Phaleria macrocarpa*) sebagai kandidat anti kanker payudara. Tujuan penelitian ini untuk mengetahui aktivitas anti kanker payudara yang terkandung dalam buah mahkota dewa (*Phaleria macrocarpa*) serta untuk mengetahui ikatan yang terjadi antara senyawa yang terkandung dalam buah mahkota dewa (*Phaleria macrocarpa*) dengan reseptor atau ligand alami. Virtual skrining dilakukan dengan melakukan docking dengan menggunakan program PLANTS, lalu dilakukan penambatan dinamika molekular dengan menggunakan program *protein-ligand simulations* di Google Colab. Hasil *molecular docking* dari 11 senyawa yang terkandung dalam buah mahkota dewa (*Phaleria macrocarpa*) yang diujikan terhadap reseptor target 1QKM dan 1X7J didapatkan 3 senyawa terbaik yaitu Lariciresinol, Matairesinol dan Quercetin yang memiliki nilai binding affinity paling baik diantara senyawa lainnya, lebih baik pula jika dibandingkan dengan obat pembanding namun tidak lebih baik jika dibandingkan dengan reseptornya yaitu 1QKM dan 1X7J. Hasil dinamika molekular Matairesinol adalah senyawa yang baik jika dibandingkan dengan senyawa lain, obat pembanding maupun reseptor 1QKM dan 1X7J karena memiliki nilai RMSD dan RMSF yang paling rendah.

**Kata Kunci** : Buah mahkota dewa, Kanker payudara, Molecular docking, Dinamika Molekular

### **Abstract**

*Breast cancer is the highest cause of cancer deaths in women, the incidence of breast cancer in Indonesia increased in 2018 from 1.4/1000 population to 1.79/1000 population. Testing the anti-breast cancer activity of compounds contained in mahkota dewa fruit (Phaleria macrocarpa) as an anti-breast cancer candidate. The purpose of this study is to determine the anti-breast cancer activity contained in the fruit of mahkota dewa (Phaleria macrocarpa) and to determine the bond that occurs between the compounds contained in the fruit of mahkota dewa (Phaleria macrocarpa) with receptors or natural ligands. Virtual screening is done by docking using PLANTS program, then molecular dynamics docking is done using program protein-ligand simulations in Google Colab. The results of molecular docking of 11 compounds contained in mahkota dewa fruit tested against the target receptors 1QKM and 1X7J obtained 3 best compounds namely Lariciresinol, Matairesinol and Quercetin which have the best binding affinity value among other compounds, better when compared to the comparator drug but not better when compared to the receptors namely 1QKM and 1X7J. The results of molecular dynamics Matairesinol is a good compound when compared to other compounds, comparative drugs and receptors 1QKM and 1X7J because it has the lowest RMSD and RMSF values.*

**Keywords:** *Crown of god fruit, Breast cancer, Molecular docking, Molecular dynamics*