

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM
TANAMAN DAUN SIRIH MERAH (*Piper crocatum* RUITZ & PAV)
SEBAGAI ANTIKANKER PAYUDARA**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana



TSALLY MAYU LAELY

31119108

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
2023**

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM
TANAMAN DAUN SIRIH MERAH (*Piper crocatum* RUIZ & PAV)
SEBAGAI ANTIKANKER PAYUDARA**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana



TSALLY MAYU LAELY

31119108

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
2023**

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM
TANAMAN DAUN SIRIH MERAH (*Piper crocatum* RUITZ & PAV)
SEBAGAI ANTIKANKER PAYUDARA**

Tsally Mayu Laely

Program Studi S1 Farmasi, Fakultas Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada.

ABSTRAK

Kanker payudara merupakan salah satu penyakit yang menimbulkan angka kesakitan dan kematian tertinggi. Daun sirih merah merupakan tanaman yang memiliki aktivitas pengobatan antikanker payudara. Tujuan penelitian ini untuk mengetahui aktivitas antikanker dan interaksi yang terjadi dari senyawa yang terkandung dalam tanaman daun sirih merah sebagai kandidat antikanker payudara. Metode yang digunakan ialah, studi komputasi dengan molekular docking, Uji pkCSM dan simulasi molekular dinamik serta prediksi sintesis dari senyawa. Diperoleh hasil *molecular docking* dari 24 senyawa yang terkandung dalam tanaman daun sirih yang diujikan terhadap 2 reseptor target. Hasil yang diperoleh pada reseptor 1X7J merupakan senyawa yang terbaik dengan nilai skor docking lebih kecil daripada ligand alaminya yaitu -90,2388. Berdasarkan parameter Lipinski of Rule senyawa terbaik yaitu quercetin juga memenuhi parameter dari Lipinski of rule. Senyawa uji terbaik berdasarkan parameter ADMET juga menunjukkan bahwa senyawa tidak toksik terhadap tubuh. Hasil yang diperoleh dari Molecular Dynamic juga menunjukkan bahwa nilai RMSD dan RMSF juga sesuai.

Kata Kunci : Daun Sirih Merah, Molekular Doking, Kanker Payudara, Reseptor.

ABSTRACT

Breast cancer is a disease that causes the highest morbidity and mortality. Red betel leaf is a plant that has anticancer activity for breast cancer. The purpose of this study was to determine the anticancer activity and interactions that occur from the compounds contained in the red betel leaf plant as breast anticancer candidates. . The methods used are computational studies with molecular docking, pkCSM tests and molecular dynamic simulations as well as predictions of the synthesis of compounds. Molecular docking results were obtained from 24 compounds contained in betel leaf tested against 2 target receptors. The results obtained for the 1X7J receptor were the best compound with a lower docking score than the natural ligand, namely -90.2388. Based on the parameters of the Lipinski of Rule, the best compound, quercetin, also met the parameters of the Lipinski of rule.

Keywords : Piper crocatum, Molecular Docking, Breast Cancer, Receptor.