

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM KULIT
BUAH MANGGIS (*Garcinia mangostana* L.) SEBAGAI ANTIKANKER
PAYUDARA**

SKRIPSI

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



RIYAN ARYANTI

31119036

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

2023

ABSTRAK

STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM KULIT BUAH MANGGIS (*Garcinia mangostana L.*) SEBAGAI ANTIKANKER PAYUDARA

Riyan Aryanti

Program Studi S1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Penyakit kanker payudara merupakan suatu pertumbuhan sel-sel payudara yang tidak terkontrol, sebagian besar terjadi pada epitel duktus dan lobulus payudara. Pengujian aktivitas dari tanaman kulit buah manggis (*Garcinia mangostana L.*) sebagai kandidat antikanker payudara. Tujuan penelitian ini untuk mengetahui aktivitas antikanker dari senyawa golongan xanton dalam kulit buah manggis (*Garcinia mangostana L.*) sebagai antikanker payudara serta untuk mengetahui toksisitas senyawa golongan xanton dalam kulit buah manggis (*Garcinia mangostana L.*) dengan reseptor kanker payudara secara *in silico*. Virtual skrining dilakukan dengan menggunakan program PLANTS, kemudian dilakukan penambatan menggunakan *AmberTools*. Hasil *molecular docking* yang terkandung dalam kulit buah manggis (*Garcinia mangostana L.*) sebanyak 31 senyawa yang diujikan terhadap reseptor 1QKM, 1X7J, 6QGG. Dari 31 senyawa yang diuji didapatkan 3 senyawa terbaik yang memiliki nilai *binding affinity* yang paling baik yaitu Toxyloxanthone A, 8-Deoxygartanin, dan Demethylcalabaxanthone. Hasil penelitian menunjukkan bahwa ketiga senyawa tersebut lebih baik dan lebih stabil dari native ligand reseptor 1X7J, tetapi tidak lebih baik dari native ligand reseptor 1QKM, 6QGG. Jadi kesimpulannya senyawa yang terkandung dalam kulit buah manggis (*Garcinia mangostana L.*) ini diketahui memiliki aktivitas antikanker yang lebih baik dan stabil dari native ligand reseptor 1X7J. Namun belum cukup baik pada kedua reseptor lainnya. Sehingga belum bisa ditunjukkan sebagai antikanker payudara.

Kata Kunci: Kulit Buah Manggis, Antikanker Payudara, Molekular Docking

Abstract

*Breast cancer is an uncontrolled growth of breast cells, mostly occurring in the ductal epithelium and breast lobules. Testing the activity of the mangosteen rind plant (*Garcinia mangostana L.*) as a breast cancer anticancer candidate. The aim of this study was to determine the anticancer activity of xanthone compounds in mangosteen (*Garcinia mangostana L.*) peel as anti-breast cancer and to determine the toxicity of xanthenes compounds in mangosteen (*Garcinia mangostana L.*) rind with breast cancer receptors in silico. Virtual screening was carried out using the PLANTS program, then tethering was carried out using AmberTools. The results of molecular docking contained in the rind of mangosteen (*Garcinia mangostana L.*) were 31 compounds tested against 1QKM, 1X7J, 6QGG receptors. Of the 31 compounds tested, the 3 best compounds with the best binding affinity values were obtained, namely Toxyloxanthone A, 8-Deoxygartanin, and Demethylcalabaxanthone. The results of the research showed that the three compounds better and more stable than native ligand receptor 1X7J, but not better than native ligand receptor 1QKM, 6QGG. So in conclusion the compounds contained in mangosteen rind (*Garcinia mangostana L.*) are known to have better and more stable anticancer activity than the native 1X7J receptor ligand. But not good enough on the other two receptors. So it can not be shown as an anticancer breast.*

Keyword: Mangosteen Skin, Breast Cancer, Molecular Docking