

STUDI IN SILIKO SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM DAUN SIRSAK (*Annona muricata*) SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER PAYUDARA

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi



ALPIN MAULANA

31119064

PROGRAM STUDI

S1 FARMASI

FAKULTAS FARMASI

UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA

PROGRAM STUDI S1 FARMASI TASIKMALAYA

2023

ABSTRAK

STUDI IN SILIKO SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM DAUN SIRSAK (*Annona muricata*) SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER PAYUDARA
Alpin Maulana

Program Studi S-1 Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

ABSTRAK

Hasil riset pada wanita Indonesia hampir 8,2 juta jiwa Wanita di Indonesia mengalami kematian karena penyakit kanker payudara, Pengujian aktivitas antikanker payudara dari senyawa yang terkandung dalam daun sirsak (*Annona Muricata L*) sebagai kandidat antikanker payudara. Tujuan penelitian ini untuk mengetahui aktivitas antikanker payudara yang terkandung dalam daun sirsak (*Annona Muricata L*) serta untuk mengetahui ikatan yang terjadi antara senyawa yang terkandung dalam daun sirsak (*Annona Muricata L*) dengan reseptor ligand alami. Virtual skirining dilakukan dengan melakukan docking dengan PLANTS, lalu dilakukan penambatan dinamika molekul dengan menggunakan AmberTools. Hasil molecular docking terdapat 17 senyawa yang diujikan yang terkandung dalam daun sirsak (*Annona Muricata L*) terhadap reseptor 1QKM dengan nilai binding affinity (-95,76). dari 17 senyawa yang terkandung dalam daun sirsak yang diuji didapatkan 3 senyawa terbaik dengan nilai binding affinity yang paling baik yaitu Higenamine (-96,63), Remerine (-94,23) dan Annonaine (-88,54). Hasil penelitian menunjukan bahwa senyawa higenamine yang terkandung dalam tanaman daun sirsak (*Annona Muricata L*) ini diketahui memiliki aktivitas antikanker payudara yang lebih baik dari native ligand 1QKM dengan nilai binding affinity Higenamine (-96,63), tetapi senyawa remerine dan annonaine tidak lebih baik dari ligand 1QKM.

Kata kunci: *daun sirsak, in siliko, kanker payudara*

ABSTRACT

The result of research on Indonesian women, almost 8.2 million women in Indonesia die from breast cancer. Testing of breast anticancer activity from compounds contained in soursop leaves (*Annona Muricata L*) as breast anticancer candidates. The purpose of this study was to determine the anticancer activity of the breast contained in soursop leaves (*Annona Muricata L*) and to determine the bond that occurs between the compounds contained in soursop leaves (*Annona Muricata L*) and natural ligand receptors. Virtual screening was carried out by docking with PLANTS, then molecular dynamics docking was carried out using AmberTools. The results of molecular docking showed that 17 compounds contained in soursop leaves (*Annona Muricata L*) were tested against 1QKM receptors with a binding affinity value (-95.76). Of the 17 compounds contained in soursop leaves tested, the 3 best compounds with the best binding affinity values were obtained, namely Higenamine (-96.63), Remerine (-94.23) and Annonaine (-88.54). The results showed that the higenamine compound contained in soursop leaves (*Annona Muricata L*) is known to have anti-breast cancer activity that is better than the native ligand 1QKM with a binding affinity hygenamine value (-96.63), but the remerine and annonaine compounds are not better than the ligand 1QKM.

Keywords: soursop leaves, in silico, breast cancer