

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM
DAUN KELOR (*Moringa oleifera L*) SEBAGAI ANTI KANKER
PAYUDARA**

SKRIPSI



VANESSA ANGELICA SHERYL

31119136

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

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM
DAUN KELOR (*Moringa oleifera L*) SEBAGAI ANTI KANKER
PAYUDARA**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana



VANESSA ANGELICA SHERYL

31119136

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

ABSTRAK

STUDI IN SILICO SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM DAUN KELOR (*Moringa oleifera L.*) SEBAGAI ANTI KANKER PAYUDARA

Vanessa Angelica Sheryl

Jurusan Farmasi Universitas Bakti Tunas Husada, Jalan Cilolohan No. 36 Tasikmalaya, Jawa Barat, Indonesia

Kanker payudara adalah jenis kanker yang paling umum pada Wanita. Daun kelor merupakan tanaman yang memiliki aktivitas sebagai pengobatan. Tujuan dari penelitian untuk mengetahui aktivitas serta mengetahui senyawa metabolit daun kelor manakah yang lebih baik dan stabil pada reseptor estrogen sebagai antikanker payudara. Metode yang digunakan ialah, studi komputasi dengan molecular *docking*, Uji pkCSM dan simulasi molecular dinamik. Hasil studi komputasi molekular *docking* dari 23 senyawa daun kelor didapatkan tiga senyawa terbaik dari hasil docking reseptor estrogen senyawa genistein terbaik pada reseptor 1QKM, senyawa genistein dan luteolin pada reseptor 1X7J dengan nilai energy bebas yang rendah. Dari pengujian pkCSM dari 23 senyawa terdapat 3 senyawa yang dipilih memiliki absorbansi dan distribusi yang baik dan prediksi toksisitas menunjukkan bahwa ada satu senyawa yang tidak memiliki hepatoksitas. Hasil molecular dinamik pada senyawa Luteolin 1X7J selama 100ns menunjukkan nilai RMSD dan RMSF yang rendah dan stabil dibandingkan senyawa pada reseptor estrogen.

Kata kunci: Antikanker Payudara, Studi komputasi, Daun Kelor, Estrogen

ABSTRACT

Breast cancer is the most common type of cancer in women. Moringa leaves are plants that have activity as a treatment. The purpose of this study was to determine the activity and find out which metabolite compounds of Moringa leaves are better and more stable at the estrogen receptor as anticancer of the breast. The methods used are computational studies with molecular docking, pkCSM tests and molecular dynamic simulations. The results of a computational molecular docking study of 23 Moringa leaf compounds obtained the three best compounds from the docking results of the best estrogen receptor genistein compounds on the 1QKM receptor, genistein and luteolin compounds on the 1X7J receptors with low free energy values. From the pkCSM test of 23 compounds, there were 3 compounds selected that had good absorption and distribution and the prediction of toxicity showed that there was one compound that did not have hepatotoxicity. The results of molecular dynamics on the Luteolin 1X7J compound for 100ns showed lower and more stable RMSD and RMSF values compared to compounds on the estrogen receptor.

Keywords: Breast Anticancer, Computational Studies, Moringa Leaves, Estrogen