

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA YANG TERKANDUNG DALAM  
TANAMAN BABANDOTAN (*Ageratum conyzoides* L.) SEBAGAI  
ANTI-KANKER PAYUDARA**

**SKRIPSI**



**ADE TRIANA ABIDIN  
31120165**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI  
FAKULTAS FARMASI  
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA  
TASIKMALAYA  
AGUSTUS 2024**

## ABSTRAK

### Studi *In Silico* Senyawa Yang Terkandung Dalam Tanaman Babandotan (*Ageratum conyzoides* L.) Sebagai Antikanker Payudara

Ade Triana Abidin

Program Studi S-1 Farmasi Universitas Bakti Tunas Husada

#### Abstrak

Kanker merupakan penyakit dimana sel-sel dapat tumbuh dan berkembang secara tidak terkendali di area tubuh tertentu serta bersifat ganas dan dapat menyerang serta menghancurkan jaringan di sekitarnya. Kanker payudara pada wanita telah melampaui kanker paru-paru sebagai kanker terbanyak. Reseptor pada antikanker payudara diantaranya reseptor estrogen dan progesterone. Penelitian ini bertujuan untuk menemukan potensi senyawa dalam tanaman babandotan (*Argentum conyzoides* L.) sebagai kandidat obat baru anti kanker melalui penambatan molekul pada reseptor estrogen dan progesterone. Metode docking molekuler digunakan untuk menganalisis interaksi antara 33 senyawa tanaman babandotan pada reseptor estrogen (PDB: 5W9C) dan progesterone (PDB: 1ZUC) dengan cyclophosphamide sebagai obat pembanding. Hasil menunjukkan senyawa kaempferol memiliki energi ikatan paling rendah pada reseptor 1ZUC dan senyawa stigmasterol memiliki energi ikatan terendah pada reseptor 5W9C dibandingkan dengan pembanding dan ligan alami. Simulasi molekuler dinamik mengkonfirmasi stabilitas senyawa tersebut selama 100 ns. Temuan ini menunjukkan potensi senyawa dalam tanaman babandotan sebagai antikanker payudara yang menjanjikan untuk pengembangan lebih lanjut dalam pengobatan kanker payudara.

**Kata kunci:** Tanaman babandotan, kanker payudara, studi in silico.

#### Abstract

*Cancer is a disease in which cells can grow and develop uncontrollably in specific areas of the body, and are malignant, capable of attacking and destroying surrounding tissues. Breast cancer in women has surpassed lung cancer as the most commonly diagnosed cancer. Receptors involved in breast cancer treatment include estrogen and progesterone receptors. This study aims to explore the potential of compounds in the babandotan plant (*Ageratum conyzoides* L.) as candidates for new anti-cancer drugs through molecular docking on estrogen and progesterone receptors. Molecular docking methods were used to analyze the interactions of 33 compounds from the babandotan plant with estrogen (PDB: 5W9C) and progesterone (PDB: 1ZUC) receptors, with cyclophosphamide as a reference drug. The results indicate that the compound kaempferol has the lowest binding energy on receptor 1ZUC, while stigmasterol has the lowest binding energy on receptor 5W9C compared to the reference and natural ligands. Molecular dynamics simulations confirmed the stability of these compounds over 100 ns. These findings suggest that compounds in the babandotan plant have promising potential as anti-breast cancer agents for further development in breast cancer treatment.*

**Keywords:** babandotan plant, breast cancer, in silico study.