

**VIRTUAL SKRINING
SENYAWA DAUN BELIMBING WULUH (*Averrhoa bilimbi* L.)
PADA RESEPTOR KANKER PAYUDARA**

SKRIPSI



**MUHAMMAD FAUZAN MAULANA ZIDANE
31120231**

**PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
JULI 2024**

ABSTRAK

VIRTUAL SKRINING SENYAWA DAUN BELIMBING WULUH (*Averrhoa bilimbi* L.) PADA RESEPTOR KANKER PAYUDARA

Muhammad Fauzan Maulana Zidane

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

Abstrak

Kanker payudara adalah penyakit dengan angka kematian tertinggi kedua di kalangan wanita. Daun belimbing wuluh (*Averrhoa bilimbi* L.) dianggap berpotensi sebagai agen sitotoksik pada sel kanker payudara. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui aktivitas antikanker dari senyawa daun belimbing wuluh (*Averrhoa bilimbi* L.) dan hubungan ikatan yang terjadi dengan reseptor kanker payudara. Metode penelitian yang digunakan yaitu studi komputasi dengan molecular docking, pkCSM, uji drugscan, dan simulasi molecular dynamic. Hasil studi komputasi molecular docking menunjukkan bahwa dari 43 senyawa daun belimbing wuluh (*Averrhoa bilimbi* L.), terdapat 5 senyawa dengan binding affinity terbaik, yaitu Squalene, 19-hydroxycinnzeylanol-19-glucoside, Dehydrophytosphingosine, Phytosphingosine, dan 2-Amino-1-hydroxyoctadec-4-en-3-one. Pengujian pkCSM dari kelima senyawa memiliki hasil yang baik dan tidak toksik. Selain itu, hasil uji drugscan mengindikasikan bahwa Squalene, 19-hydroxycinnzeylanol-19-glucoside, 2-amino-1-hydroxyoctadec-4-en-3-one, dan Dehydrophytosphingosine memenuhi syarat parameter uji. Namun, simulasi dinamika molekuler selama 10ns menunjukkan bahwa Squalene, 19-hydroxycinnzeylanol-19-glucoside, dan 2-amino-1-hydroxyoctadec-4-en-3-one memiliki nilai RMSD yang stabil, sementara kelima senyawa menunjukkan nilai RMSF yang kurang stabil.

Kata Kunci: Virtual Skrining, Daun Belimbing Wuluh, Kanker Payudara

Abstract

Breast cancer is a disease with the second highest mortality rate among women. Averrhoa bilimbi L is considered to have potential as a cytotoxic agent on breast cancer cells. This study aims to determine the anticancer activity of Averrhoa bilimbi L compounds and the bonding relationship that occurs with breast cancer receptors. The research methods used are computational studies with molecular docking, pkCSM, drugscan test, and molecular dynamic simulation. The results of the molecular docking computational study showed that from 43 compounds of Averrhoa bilimbi L, there were 5 compounds with the best binding affinity, namely Squalene, 19-hydroxycinnzeylanol-19-glucoside, Dehydrophytosphingosine, Phytosphingosine, and 2-Amino-1-hydroxyoctadec-4-en-3-one. The pkCSM testing of the five compounds had good and non-toxic results. In addition, the drugscan test results indicated that Squalene, 19-hydroxycinnzeylanol-19-glucoside, 2-amino-1-hydroxyoctadec-4-en-3-one, and Dehydrophytosphingosine qualified the test parameters. However, molecular dynamics simulations for 10ns showed that Squalene, 19-hydroxycinnzeylanol-19-glucoside, and 2-amino-1-hydroxyoctadec-4-en-3-one had stable RMSD values, while all five compounds showed less stable RMSF values.

Keywords: Virtual Screening, *Averrhoa bilimbi* L, Breast Cancer