

**STUDI IN SILICO SENYAWA AKTIF PEPAYA (*Carica papaya*)
SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER PAYUDARA**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi



RIEDHO PRIMA CAHYA

31121098

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

2025

ABSTRAK
STUDI IN SILICO SENYAWA AKTIF PEPAYA (*Carica papaya*) SEBAGAI
KANDIDAT ANTIKANKER PAYUDARA

Riedho Prima Cahya

Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstrak

Pepaya (*Carica papaya*) dan senyawa turunannya merupakan kandidat potensial dalam upaya pengendalian kanker payudara, mampu mengurangi efek samping dari agen bakteri serta menunjukkan potensi sebagai agen antikanker. Penelitian komputasi dilakukan dengan berbagai metode seperti molecular docking menggunakan PyRx, molecular dynamic dengan perangkat lunak Desmond, analisis Drug Scan berdasarkan Lipinski's Rule of Five, serta evaluasi farmakokinetik (ADMET) melalui situs web pkCSM. Berdasarkan hasil molecular docking terhadap 148 senyawa menunjukkan bahwa Luteoxanthin memiliki afinitas ikatan yang rendah (-12,54 kkal/mol) terhadap reseptor progesteron (1SQN) -10,90 kkal/mol dan mendekati nilai energi reseptor estrogen (6PSJ) -13,39 kkal/mol, dibandingkan dengan tamoxifen. Hasil molecular dynamic molekular selama 100 ns menunjukkan bahwa Gibberellin-A3 pada 1SQN dan Luteoxanthin pada 6PSJ merupakan senyawa yang paling stabil. Uji farmakokinetik (ADMET) menunjukkan Beta-Eudesmol dan Luteoxanthin memiliki nilai absorpsi yang baik, sementara Beta-Eudesmol dan Gibberellin-A3 menunjukkan profil distribusi yang optimal. Uji ekskresi menunjukkan hasil positif untuk BetaEudesmol dan ketiga senyawa Beta-Eudesmol, Luteoxanthin dan Gibberellin-A3 tidak menunjukkan sifat toksik. Hal ini mengindikasikan bahwa senyawa-senyawa tersebut memiliki potensi sebagai kandidat agen antikanker payudara.

Kata Kunci : Antikanker Payudara, Estrogen, In-Silico, Progesteron, *Carica papaya*

Abstract

Papaya (Carica papaya) and its derivatives are potential candidates in the control of breast cancer, capable of reducing the side effects of bacterial agents and showing potential as anticancer agents. Computational studies were conducted using various methods, including molecular docking with PyRx, molecular dynamic with Desmond software, Drug Scan analysis based on Lipinski's Rule of Five, and pharmacokinetic evaluation (ADMET) via the pkCSM website. Based on molecular docking results for 148 compounds, Luteoxanthin showed low binding affinity (-12,54 kcal/mol) to the progesterone receptor (1SQN) (-10,90 kcal/mol) and was close to the energy value of the estrogen receptor (6PSJ) (-13,39 kcal/mol), compared to tamoxifen. Molecular dynamics simulations over 100 ns showed that Gibberellin-A3 at 1SQN and Luteoxanthin at 6PSJ are the most stable compounds. Pharmacokinetic (ADMET) testing showed that Beta-eudesmol and Luteoxanthin have good absorption value, while Beta-eudesmol and Gibberellin-A3 exhibit optimal distribution profiles, Excretion test yielded positive results for Beta-eudesmol, and all three compounds Beta-eudesmol, Luteoxanthin, and Gibberellin-A3 exhibited no toxic properties. This indicates that these compounds have potential as candidates for breast cancer agents.

Keywords : Breast Anticancer, Estrogen, In-Silico, Progesteron, *Carica papaya*