

**STUDI IN SILICO SENYAWA AKTIF DELIMA
(*Punica granatum*)
SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER PAYUDARA**

**SKRIPSI
Diajukan untuk memperoleh Gelar Sarjana Farmasi**



**ABI RAFDI PUTRA PAMUNGKAS
31121101**

**PROGRAM STUDI S1
FARMASI FAKULTAS
FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS
HUSADA TASIKMALAYA
JULI 2025**

ABSTRAK

STUDI IN SILICO SENYAWA AKTIF DELIMA (*Punica granatum*) SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER PAYUDARA

Abi Rafdi Putra Pamungkas

Program Studi S1 Farmasi Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya

Abstract

Breast cancer is the most common cancer in women and remains a major health concern. Conventional treatments like chemotherapy often cause significant side effects, leading to the need for safer alternatives. This study aimed to evaluate the potential of active compounds found in pomegranate seeds using an *in silico* approach. Two receptors associated with breast cancer, estrogen (6PSJ) and progesterone (1SQN), were used as targets in molecular docking and molecular dynamics simulations. Results showed that estriol had stronger and more stable binding affinity compared to tamoxifen, a standard anticancer drug. A 100-nanosecond molecular dynamics simulation also confirmed the structural stability of the estriol–receptor complex. These findings suggest that estriol from pomegranate seeds has promising potential as a natural-based anticancer candidate.

Keywords: pomegranate, breast cancer, *in silico*, estriol, *docking*

Abstrak

Kanker payudara merupakan jenis kanker paling umum pada wanita dan masih menjadi masalah kesehatan serius. Terapi seperti kemoterapi sering menimbulkan efek samping, sehingga diperlukan alternatif yang lebih aman. Penelitian ini bertujuan mengevaluasi potensi senyawa aktif dari biji buah delima menggunakan pendekatan *in silico*. Dua reseptor yang berperan pada kanker payudara, yaitu estrogen (6PSJ) dan progesteron (1SQN), dianalisis melalui metode *molecular docking* dan *molecular dynamics*. Hasil menunjukkan bahwa estriol memiliki afinitas dan kestabilan ikatan lebih baik dibanding tamoxifen sebagai obat pembanding. Simulasi selama 100 nanodetik juga mendukung stabilitas kompleks estriol–reseptor. Temuan ini menunjukkan bahwa estriol dari biji delima berpotensi menjadi kandidat obat antikanker alami.

Kata kunci: delima, kanker payudara, *in silico*, estriol, *docking*

