

**STUDI *MOLECULAR DOCKING* DAN ADMET SENYAWA
BIOAKTIF TEMULAWAK (*Curcuma xanthorrhiza*) SEBAGAI
INHIBITOR JALUR PI3K/MTOR UNTUK TERAPI KANKER
PAYUDARA**

SKRIPSI



**Neng Sarah Nurhanifah Hidayat
10016224210**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALYA
JANUARI 2026**

**STUDI *MOLECULAR DOCKING* DAN ADMET SENYAWA
BIOAKTIF TEMULAWAK (*Curcuma xanthorrhiza*) SEBAGAI
INHIBITOR JALUR PI3K/MTOR UNTUK TERAPI KANKER
PAYUDARA**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi



**Neng Sarah Nurhanifah Hidayat
10016224210**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS BAKTI TUNAS HUSADA
TASIKMALAYA
JANUARI 2026**

ABSTRAK

Kanker payudara merupakan salah satu penyebab utama kematian pada wanita, dengan jalur PI3K/mTOR berperan penting dalam proliferasi dan kelangsungan hidup sel kanker. Penelitian ini bertujuan mengevaluasi potensi senyawa bioaktif temulawak (*Curcuma xanthorrhiza*) sebagai inhibitor jalur PI3K/mTOR melalui pendekatan *in silico* menggunakan molecular docking dan analisis ADMET. Molecular docking dilakukan terhadap reseptor PI3K (4TV3) dan mTOR (4JT5) menggunakan AutoDock Vina, sedangkan analisis ADMET diprediksi menggunakan pkCSM. Hasil molecular docking menunjukkan bahwa senyawa 3'-demethoxycyclocurcumin memiliki afinitas pengikatan paling kuat terhadap reseptor mTOR (4JT5) dengan nilai energi bebas ikatan (ΔG) $-8,97$ kkal/mol dan konstanta inhibisi (K_i) $2,01$ μM , lebih baik dibandingkan ligan alami (ΔG $-7,92$ kkal/mol). Pada reseptor PI3K (4TV3), senyawa ini juga menunjukkan interaksi stabil dengan nilai ΔG $-8,58$ kkal/mol. Analisis ADMET menunjukkan bahwa seluruh senyawa uji memiliki Human Intestinal Absorption $>70\%$, permeabilitas $CaCO_2$ yang memadai, penetrasi *Blood-Brain Barrier* yang rendah, serta diprediksi tidak bersifat mutagenik (AMES negatif) dan tidak hepatotoksik, dengan nilai LD_{50} yang relatif aman. Berdasarkan hasil tersebut, senyawa bioaktif temulawak, khususnya 3'-demethoxycyclocurcumin, berpotensi dikembangkan sebagai kandidat terapi kanker payudara melalui penghambatan jalur PI3K/mTOR.

Kata kunci: kanker payudara, *Curcuma xanthorrhiza*, PI3K/mTOR, molecular docking, ADMET.

ABSTRACT

Breast cancer is one of the leading causes of death in women, with the PI3K/mTOR pathway playing an important role in cancer cell proliferation and survival. This study aims to evaluate the potential of bioactive compounds from temulawak (Curcuma xanthorrhiza) as inhibitors of the PI3K/mTOR pathway through an in silico approach using molecular docking and ADMET analysis. Molecular docking was conducted against PI3K (4TV3) and mTOR (4JT5) receptors using AutoDock Vina, while ADMET analysis was predicted using pkCSM. The molecular docking results showed that the compound 3'-demethoxycyclocurcumin has the strongest binding affinity to the mTOR receptor (4JT5) with a binding free energy (ΔG) of -8.97 kcal/mol and an inhibition constant (K_i) of 2.01 μM , better than the natural ligand (ΔG -7.92 kcal/mol). For the PI3K receptor (4TV3), this compound also demonstrated stable interactions with a ΔG of -8.58 kcal/mol. ADMET analysis showed that all test compounds have Human Intestinal Absorption $>70\%$, adequate $CaCO_2$ permeability, low Blood-Brain Barrier penetration, and are predicted to be non-mutagenic (AMES negative) and non-hepatotoxic, with relatively safe LD_{50} values. Based on these results, bioactive compounds from temulawak, particularly 3'-demethoxycyclocurcumin, have the potential to be developed as breast cancer therapy candidates through inhibition of the PI3K/mTOR pathway.

Keywords: breast cancer, *Curcuma xanthorrhiza*, PI3K/mTOR, ADMET