

**SKRINING SENYAWA ANTIKANKER PAYUDARA PADA
BUAH PERSIK (*Prunus persica* L.) DENGAN AKTIVASI ER- β
MELALUI *MOLECULAR DOCKING***



SKRIPSI

Oleh:

**ERNI MURNININGSIH
42119018**

**PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS PERADABAN
2024**

**SKRINING SENYAWA ANTIKANKER PAYUDARA PADA
BUAH PERSIK (*Prunus persica* L.) DENGAN AKTIVASI ER- β
MELALUI *MOLECULAR DOCKING***



SKRIPSI

**Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat mencapai
Derajat Sarjana Farmasi (S.Farm.)**

Oleh:

**ERNI MURNININGSIH
42119018**

**PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS PERADABAN
2024**

PERNYATAAN PENULIS

JUDUL : SKRINING SENYAWA ANTIKANKER PAYUDARA PADA
BUAH PERSIK (*Prunus Persica* (L)) DENGAN AKTIVASI ER-
 β MELALUI *MOLECULAR DOCKING*
NAMA : ERNI MURNININGSIH
NIM : 42119018

Saya menyatakan dan bertanggungjawab dengan sebenarnya bahwa Skripsi ini adalah karya saya sendiri kecuali cuplikan dan ringkasan yang masing-masing telah saya jelaskan sumbernya. Jika pada waktu selanjutnya ada pihak lain yang mengklaim bahwa Skripsi ini sebagai karyanya, yang disertai dengan bukti-bukti yang cukup, maka saya bersedia untuk dibatalkan gelar Sarjana Farmasi saya beserta hak dan kewajiban yang melekat pada gelar tersebut.

Bumiayu, 13 Februari 2023
Penulis

ERNI MURNININGSIH
NIM. 42119018

PERSETUJUAN SKRIPSI

JUDUL : SKRINING SENYAWA PADA BUAH PERSIK (*Prunus Persica*
(L)) SEBAGAI ANTIKANKER PAYUDARA DENGAN
AKTIVASI ER- β MELALUI *MOLECULAR DOCKING*
NAMA : ERNI MURNININGSIH
NIM : 42119018

Skrripsi ini telah diperiksa dan disetujui
Bumiayu, 06 Februari 2023

Mengetahui,

Pembimbing I,



Syaiful Prayogi, M.Farm.
NIPY. 18.12.101

Pembimbing II,



Luthfi Hidayat Maulana, S.KM., M.Si.
NIDN. 0626078902

Ketua Program Studi,



Luthfi Hidayat Maulana, S.KM., M.Si.
NIDN. 0626078902

PENGESAHAN SKRIPSI

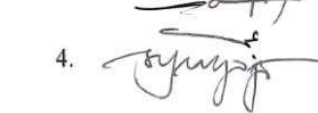
JUDUL : SKRINING SENYAWA ANTIKANKER PAYUDARA PADA
BUAH PERSIK (*Prunus Persica* (L)) DENGAN AKTIVASI ER- β
MELALUI *MOLECULAR DOCKING*
NAMA : ERNI MURNININGSIH
NIM : 42119018

Skripsi ini telah diujikan dan dipertahankan di depan Dewan Penguji pada sidang Skripsi tanggal 13 Februari 2023. Menurut pandangan kami, skripsi ini memadai dari segi kualitas untuk tujuan penganugrahan gelar Sarjana Farmasi (S. Farm) Bumiayu, 13 Februari 2023

Nama Penguji

Tanda Tangan

1. apt. Tunjung Winarno, M.Farm.
NIDN. 0615057902
2. apt. Ubun Fadli Serahli, M.Farm
NIDN. 0605029102
3. Luthfi Hidayat Maulana, S.KM., M.Si
NIDN. 0626078902
4. Syaiful Prayogi, M.Farm
NIPY. 18.12.101

1. 
2. 
3. 
4. 

Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
Universitas Peradaban


Dr. apt. Pudiono, S.U
NUPN. 9990000424

Ketua Program Studi Farmasi


Luthfi Hidayat Maulana, S.KM., M.Si.
NIDN. 0626078902

MOTO DAN PERSEMBAHAN

Tidak ada sesuatu yang mustahil untuk dicapai. Tidak ada sesuatu yang mustahil untuk diselesaikan. Karena “*sesungguhnya Allah bebas melaksanakan kehendak-Nya, dia telah menjadikan untuk setiap sesuatu menurut takarannya*”.
(QS At-Thalaq: 3)

Alhamdulillahirobil'amin

Kupanjatkan kepada Allah SWT atas segala rahmat dan karunia-Mu yang telah memberikanku kekuatan dalam segala cobaan, membekaliku ilmu dalam menjalani hidup, serta melimpahkannya kemudahan dalam segala urusan. Saya ucapkan syukur kepadamu Ya Allah, karena telah memberikan jalan kepadaku untuk dapat menyelesaikan skripsi ini dengan penuh ketekunan dan perjuangan. Kupersembahkan karya sederhana ini untuk alm kakek saya mbah samadi, yang telah memberikan kasih sayang, dukungan kepada saya semasa hidup almarhum didunia. Semoga dengan selesainya skripsi ini bisa menjadi salah satu bahagia mbah melihat cucu tersayang ini mampu menyelesaikan Pendidikan di perguruan tinggi.

ABSTRACT

Screening for Breast Anticancer Compounds in Peaches (*Prunus persica* L.) with ER- β Activation through Molecular Docking

Erni Murniningsih, Syaiful Prayogi, Luthfi Hidayat Maulana

Email: erniff.mnsh11@gmail.com

*One of the leading causes of cancer-related mortality among females is breast cancer. We need to find ways to harness the power of natural ingredients to create more targeted and selective therapies for breast cancer. Peaches (*Prunus persica* L.) contain secondary metabolite compounds that inhibit the metastasis of breast cancer cells, giving them anticancer properties. This study's objective is to use molecular docking to identify peach (*Prunus persica* L.) compounds with breast cancer-fighting potential, and to examine the interaction between peach compounds' anticancer activity and ER- β receptors. Investigating the molecular docking method's ability to identify ligand-receptor complexes and the binding effects of ligands derived from plant compounds with receptors—a protein target for breast cancer—represents the exploratory qualitative research here. The process of molecular docking involved multiple steps, such as modelling and optimising compound structures, preparing the ER- β protein, validating docking, running the docking process, and visualising interactions. Based on the binding energy values of (-7,1), (-7,4), and (7,2) and different bonds in hydrophobic, electrostatic, and hydrogen forms, the results demonstrated that peach catechi compounds, Cyanidin-3-O-rutinoside, and Quercetin-3-O-rutinoside may have anti-breast cancer potential. Among the existing drug candidates for breast cancer, cyanidin-3-O-rutinoside has the most promise through ER- β activation.*

Keywords: Breast cancer, cyanidin-3-O-rutinoside, estrogen receptor, molecular docking, peaches.

ABSTRAK

Skrining Senyawa Antikanker Payudara Pada Buah Persik (*Prunus persica* L.) dengan Aktivasi ER- β melalui *Molecular Docking*

Erni Murniningsih, Syaiful Prayogi, Luthfi Hidayat Maulana

Email: erniff.mnsh11@gmail.com

Salah satu penyebab utama kematian akibat kanker di kalangan wanita adalah kanker payudara. Kita perlu menemukan cara untuk memanfaatkan kekuatan bahan-bahan alami untuk menciptakan terapi kanker payudara yang lebih bertarget dan selektif. Persik (*Prunus persica* L.) mengandung senyawa metabolit sekunder yang menghambat metastasis sel kanker payudara sehingga memberikan sifat antikanker. Tujuan penelitian ini adalah menggunakan docking molekuler untuk mengidentifikasi senyawa buah persik (*Prunus persica* L.) yang berpotensi melawan kanker payudara, dan untuk menguji interaksi antara aktivitas antikanker senyawa buah persik dan reseptor ER- β . Menyelidiki kemampuan metode docking molekuler untuk mengidentifikasi kompleks ligan-reseptor dan efek pengikatan ligan yang berasal dari senyawa tanaman dengan reseptor—target protein untuk kanker payudara—mewakili penelitian kualitatif eksplorasi di sini. Proses docking molekuler melibatkan beberapa langkah, seperti pemodelan dan optimalisasi struktur senyawa, penyiapan protein ER- β , validasi docking, menjalankan proses docking, dan visualisasi interaksi. Berdasarkan nilai energi ikat (-7.1), (-7.4), dan (7.2) serta perbedaan ikatan dalam bentuk hidrofobik, elektrostatik, dan hidrogen, diperoleh hasil senyawa peach catechi, Cyanidin-3 -O-rutinoside, dan Quercetin-3-O-rutinoside mungkin memiliki potensi anti-kanker payudara. Di antara kandidat obat kanker payudara yang ada, cyanidin-3-O-rutinoside memiliki harapan paling besar melalui aktivasi ER- β .

Kata kunci: Buah persik, cyanidin 3-O-rutinoside, estrogen reseptor, kanker payudara, *molecular docking*.

KATA PENGANTAR

Puji syukur kehadiran Allah SWT atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Skrining Senyawa Antikanker Payudara Pada Buah Persik (*Prunus persica* L.) dengan Aktivasi ER- β melalui *Molecular Docking*”. Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat untuk menyelesaikan program Pendidikan tingkat Strata 1 (S1) pada Program Studi Farmasi Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Peradaban. Penyusunan Skripsi ini tidak lepas dari bantuan berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis mengucapkan terima kasih kepada:

1. Dr. Muh. Kadarisman., S.H., M.Si. selaku Rektor Universitas Peradaban.
2. Dr. apt. Pudjono, S.U selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Peradaban.
3. Luthfi Hidayat Maulana, S.KM., M.Si. selaku Ketua Jurusan Farmasi Universitas Peradaban.
4. Syaiful Prayogi, M.Farm. selaku Dosen Pembimbing 1 dan Luthfi Hidayat Maulana, S.KM., M.Si. selaku Dosen Pembimbing II yang telah membimbing dan membantu dengan penuh keikhlasan dan kesabaran sehingga skripsi ini dapat dibuat dengan baik.
5. apt. Tunjung Winarno, M.Farm. dan apt. Ubun Fadli Serahli, M.Farm. selaku Dosen Penguji yang telah memberikan saran dan masukan bagi penulis dalam penyelesaian skripsi ini.

6. Syaiful Prayogi, M.Farm. selaku laboran di Laboratorium Farmasi Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Peradaban yang telah membantu kelancaran selama penelitian.
7. Semua keluarga tercinta tak terkecualikan, orang tua saya yang telah membuat saya kuat sampai dengan selesainya skripsi ini.
8. Teman-teman Prodi Farmasi angkatan 2019, serta semua pihak yang telah membantu dalam penyusunan skripsi ini yang tidak dapat penulis sebutkan satu persatu.
9. Pemilik NIM 42119018 saya sendiri Erni Murniningsih, terima kasih telah berjuang sampai dengan detik ini dan sampai dengan selesainya skripsi ini. Terima kasih telah berjuang dengan begitu banyak ujian menyertaimu. Kamu hebat sampai pada titik ini, im so proud of you. Tetaplah menjadi baik, kuat dan sabar di lembaran berikutnya entah itu badai yang akan menimpa ataupun bunga yang akan kau terima.

Terlalu banyak orang yang berjasa kepada penulis selama penyusunan skripsi ini hanya rasa terima kasih yang dapat penulis sampaikan serta doa dan harapan semoga Allah SWT melipat gandakan pahala bagi semua. Atas perhatian dan dukungannya penulis menyampaikan terima kasih.

Bumiayu, 13 Februari 2023

ERNI MURNININGSIH
NIM. 42119018

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN SAMPUL	i
HALAMAN JUDUL	ii
PERNYATAAN PENULIS	iii
PERSETUJUAN SKRIPSI	iv
PENGESAHAN SKRIPSI	v
MOTO DAN PERSEMBAHAN	vi
ABSTRACT	vii
ABSTRAK	viii
KATA PENGANTAR	ix
DAFTAR ISI	xi
DAFTAR TABEL	xii
DAFTAR GAMBAR	xiii
DAFTAR LAMPIRAN	xiv
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Rumusan Masalah	4
C. Tujuan Penelitian	4
D. Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	6
A. Kanker Payudara dan Reseptor Target	6
B. Buah Persik (<i>Prunus persica</i> L.)	10
C. Kajian penelitian yang relevan	19
D. Kerangka Pikir	20
E. Hipotesis	20
BAB III METODE PENELITIAN	21
A. Jenis Penelitian	21
B. Tempat dan Waktu Penelitian	21
C. Variabel Penelitian	21
D. Definisi Operasional	22
E. Alat dan Bahan	23
F. Cara Kerja	25
G. Alur Penelitian	27
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	28
A. Pemodelan Struktur Senyawa	28
B. Preparasi Protein	31

C. Validasi <i>Docking</i>	32
D. Hasil <i>Docking</i>	34
BAB V PENUTUP	44
A. Kesimpulan	44
B. Saran.....	45
DAFTAR PUSTAKA	46
LAMPIRAN	51

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Kandungan senyawa ekstrak etanol buah persik.....	14
Tabel 2.2 Kajian penelitian yang relevan.....	19
Tabel 3.3 Definisi operasional.....	22
Tabel 4.4 Hasil pemodelan struktur senyawa fitoestrogen	28
Tabel 4.5 Hasil validasi <i>docking</i> ligan alami dengan protein ER- β	33
Tabel 4.6 Interaksi ligan uji dengan protein ER- β	36

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Estrogen Reseptor Beta (ER- β)	8
Gambar 2.2 Buah Persik	10
Gambar 2.3 Struktur senyawa fitoestrogen buah persik	16
Gambar 2.4 Kerangka pikir penelitian	20
Gambar 3.5 Ligan/senyawa uji	25
Gambar 3.6 Bagan alur penelitian	27
Gambar 4.7 Struktur kristal protein ER- β	31
Gambar 4.8 Grid box <i>site docking</i> protein ER- β	32
Gambar 4.9 Interaksi ligan alami dengan protein ER- β	33
Gambar 4.10 Interaksi ligan uji dengan protein ER- β	38

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Surat Izin Penelitian	51
Lampiran 2. Kartu Akses Laboratorium	52
Lampiran 3. Surat Keterangan Penelitian	53
Lampiran 4. Hasil <i>Docking</i>	54
Lampiran 5. Dokumentasi	58
Lampiran 6. Biodata Peneliti.....	64