ANALISIS STUDI IN SILLICO HERB-DRUG INTERACTION SENYAWA CHALCONE TEMU KUNCI *(Boesenbergia rotunda)* DENGAN OBAT LINI PERTAMA KANKER PAYUDARA

SKRIPSI

Oleh:

NABILLA DEFIRA PUTRI MAISAAN
42122032

PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS PERADABAN
2026

ANALISIS STUDI IN SILLICO HERB-DRUG INTERACTION SENYAWA CHALCONE TEMU KUNCI *(Boesenbergia rotunda)* DENGAN OBAT LINI PERTAMA KANKER PAYUDARA

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat pelaksanaan penelitian skripsi untuk mencapai derajat Sarjana Farmasi (S.Farm.)

Oleh:

NABILLA DEFIRA PUTRI MAISAAN
42122032

PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS PERADABAN

2026

SURAT PERNYATAAN PENULIS
PENGGUNAAN KECERDASAN BUATAN (AI)

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Nabilla Defira Putri Maisaan

NIM : 42122032

Program Studi : Farmasi

Menyatakan dengan sebenarnya bahwa dalam penyusunan Proposal,

Judul : ANALISIS STUDI IN SILLICO HERB-DRUG INTERACTION SENYAWA CHALCONE TEMU KUNCI (*Boesenbergia rotunda*) DENGAN OBAT LINI PERTAMA KANKER PAYUDARA.

saya telah menggunakan bantuan alat Kecerdasan Buatan (AI) sebagai berikut:

1. Alat AI yang Digunakan : ChatGPT, Perplexity, PublishorPherish
2. Tujuan Penggunaan : Memperbaiki tata bahasa, mencari referensi awal, atau menyusun kerangka berpikir.
3. Metode Verifikasi : Saya telah memverifikasi ulang semua data, referensi, danklaim yang dihasilkan oleh AI untuk memastikan keabsahannya.

Saya sadar bahwa penggunaan AI tanpa pengakuan yang jujur dapat dianggap sebagai tindakan plagiarisme. Seluruh konten ilmiah dalam karya ini tetap merupakan tanggung jawab saya sepenuhnya.

Bumiayu, Juli 2026
Penulis



NABILLA DEFIRA PUTRI M
NIM. 42122032

PERNYATAAN PENULIS

JUDUL : ANALISIS STUDI IN SILLICO HERB-DRUG INTERACTION SENYAWA CHALCONE TEMU KUNCI *(Boesenbergia rotunda)* DENGAN OBAT LINI PERTAMA KANKER PAYUDARA.

NAMA : NABILLA DEFIRA PUTRI MAISAAN

NIM : 42122032

Saya menyatakan dan bertanggungjawab dengan sebenarnya bahwa Proposal ini adalah hasil karya saya sendiri kecuali cuplikan dan ringkasan yang masing-masing telah saya jelaskan sumbernya. Jika ada pihak lain yang mengklaim bahwa Proposal ini sebagai karyanya, yang disertai dengan bukti-bukti yang cukup, maka saya bersedia untuk menerima sanksi sesuai peraturan yang berlaku.

Bumiayu, Juli 2026

Penulis



NABILLA DEFIRA PUTRI M

NIM. 42122032

PERSETUJUAN SKRIPSI

JUDUL : ANALISIS STUDI IN SILLICO HERB-DRUG INTERACTION SENYAWA CHALCONE TEMU KUNCI *(Boesenbergia rotunda)* DENGAN OBAT LINI PERTAMA KANKER PAYUDARA.

NAMA : NABILLA DEFIRA PUTRI MAISAAN

NIM : 42122032

Skripsi ini telah diperiksa dan disetujui

Bumiayu, 10 Juli 2026

Mengetahui,

Pembimbing I,	Pembimbing II,
Syaiful Prayogi, S.Farm., M.Farm.	Rike Silpiana S.Farm., M.Farm.
NIDN. 0602119303	NIDN. -

Ketua Program studi,

Syaiful Prayogi, S.Farm., M.Farm.
NIDN. 0602119303

PENGESAHAN SKRIPSI

JUDUL : ANALISIS STUDI IN SILLICO HERB-DRUG INTERACTION SENYAWA CHALCONE TEMU KUNCI *(Boesenbergia rotunda)* DENGAN OBAT LINI PERTAMA KANKER PAYUDARA.

NAMA : NABILLA DEFIRA PUTRI MAISAAN

NIM : 42122032

Skripsi ini telah diujikan dan dipertahankan di depan Dewan Penguji pada Sidang Skripsi tanggal 26 Juli 2026 menurut pandangan kami, Skripsi ini memadai dari segi kualitas untuk tujuan penganugrahan gelar Sarjana Farmasi (S.Farm.)

Bumiayu, Juli 2026

Nama Penguji:	Tanda tangan
1. apt. Teguh Hary Kartono, M. Farm. NIDN. 0621048202	.....
2. Resa Frafela Rosmi, S.Si., M.Sc. NIDN. 0604059002	.....
3. Syaiful Prayogi, S.Farm., M.Farm. NIDN. 0602119303	.....
4. Rike Silpiana S.Farm., M.Farm. NIDN. -	.....

Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
Universitas Peradaban

Achmad Syauqi, M.Kom.
NIDN. 0604068804

Ketua Program Studi Farmasi
Universitas Peradaban

Syaiful Prayogi, S.Farm., M.Farm.
NIDN. 0602119303

ABSTRACT

NABILLA DEFIRA PUTRI M. 2026. *ANALISIS STUDI IN SILLICO HERB-DRUG INTERACTION SENYAWA CHALCONE TEMU KUNCI (Boesenbergia Rotunda) DENGAN OBAT LINI PERTAMA KANKER PAYUDARA*. SKRIPSI. PROGRAM STUDI FARMASI. UNIVERSITAS PERADABAN. Syaiful Prayogi, S.Farm., M.Farm. dan Rike Silpiana S.Farm., M.Farm.

Breast cancer is the leading cause of death among women, with high prevalence globally and in Indonesia. First-line treatments such as tamoxifen (targeting ERα) and trastuzumab (targeting HER2) are effective but can cause side effects and resistance, highlighting the need for complementary herbal therapies. Keyu (Boesenbergia rotunda), rich in chalcones (panduratin A, pinostrobin chalcone, boesenbergin A), represents a potential candidate. This study employed in silico molecular docking to analyze binding affinity, interaction patterns, binding competition, predictions of synergistic/antagonistic effects, and ADMET profiles of these chalcones against ERα (PDB: 8W07) and HER2 (PDB: 2JAB) receptors, compared to standard drugs. The findings are expected to identify potential pharmacodynamic and pharmacokinetic Herb-Drug Interactions (HDI) to support evidence-based safe therapy.

Keywords: HDI, chalcone, Boesenbergia rotunda, breast cancer, ERα, HER2, ADMET.

ABSTRAK

NABILLA DEFIRA PUTRI M. 2026. *ANALISIS STUDI IN SILLICO HERB-DRUG INTERACTION SENYAWA CHALCONE TEMU KUNCI (Boesenbergia Rotunda) DENGAN OBAT LINI PERTAMA KANKER PAYUDARA*. SKRIPSI. PROGRAM STUDI FARMASI. UNIVERSITAS PERADABAN. Syaiful Prayogi, S.Farm., M.Farm. dan Rike Silpiana S.Farm., M.Farm.

Kanker payudara merupakan penyebab kematian utama di kalangan wanita dengan prevalensi tinggi secara global dan di Indonesia. Pengobatan lini pertama seperti tamoxifen (target ERα) dan trastuzumab (target HER2) efektif namun menimbulkan efek samping dan resistensi, sehingga diperlukan terapi komplementer dari herbal seperti temu kunci *(Boesenbergia rotunda)* yang kaya chalcone *(panduratin A, pinostrobin chalcone, boesenbergin A)*. Penelitian ini menggunakan metode in silico molecular docking untuk menganalisis afinitas pengikatan, pola interaksi, kompetisi binding, prediksi efek sinergis/antagonis, serta profil ADMET chalcone terhadap reseptor ERα (PDB: 8W07) dan HER2 (PDB: 2JAB), dibandingkan dengan obat standar. Hasil diharapkan mengidentifikasi potensi *Herb-Drug Interaction* (HDI) farmakodinamik dan farmakokinetik untuk mendukung terapi aman berbasis bukti.

Kata kunci : HDI, chalcone, *Boesenbergia rotunda*, kanker payudara, ERα, HER2, ADMET.

MOTO PERSEMBAHAN

”Sesunguhnya sesudah ada kemudahan itu ada kemudahan, maka apabila kamu telah selesai (dari sesuatu urusan), kerjakanlah dengan sesungguh-sungguhnya (urusan) yang lain, dan hanya kepada Tuhanmulah hendaknya kamu berharap”
(Q.S Al-Insyirah, 94: 6-8)

”All of the mistakes I made. Whatever the price I paid. Shout out to the old me, everything you showed me, glad you didn’t listen when the world was tryna slow me”

(5 Second of Summer)

"No struggle is ever in vain. Every small step taken with sincerity and determination leads to a greater destination."

(Nabilla Defira Putri Maisaan)

Alhamdulillahirobilalamin

Saya panjatkan kepada Allah SWT atas segala rahmat dan karunia-Nya yang telah memberikanku kekuatan dalam menghadapai segala cobaan dan melimpahkan segala kemudahan dalam segala urusan hingga skripsi saya selesai.

Karya sederhana ini saya persembahkan kepada kedua orang tua tercinta, Bapak Deden Hendriana dan Ibu Een Fariha, atas segala doa, kasih sayang, dukungan, dan pengorbanan yang tiada henti. Kepada keluarga dan orang-orang terdekat yang selalu menjadi sumber semangat dan kekuatan. Serta untuk diri saya sendiri, terima kasih telah bertahan, berjuang, dan tidak menyerah dalam setiap proses. Semoga pencapaian ini menjadi awal dari langkah-langkah yang lebih baik di masa depan.

KATA PENGANTAR

Puji syukur kehadirat Allah SWT, Tuhan Yang Maha Pengasih dan Penyayang yang telah melimpahkan rahmat-Nya, sehingga penulis dapat menyelesaikan penelitian dalam rangka penulisan skripsi. Skripsi ini ditulis dengan judul:“ ANALISIS STUDI *IN SILLICO HERB-DRUG INTERACTION* SENYAWA *CHALCONE* TEMU KUNCI *(Boesenbergia Rotunda)* DENGAN OBAT LINI PERTAMA KANKER PAYUDARA.”.

Pada kesempatan ini, penulis mengucapkan terimakasih yang tidak terhingga kepada sebagai berikut:

1. Assoc. Prof. Dr. H. Sutarmin, S.Si., M.M. selaku Rektor Universitas Peradaban.
2. Achmad Syauqi, M.Kom. selaku Dekan Fakultas Sains dan Tekonogi Universitas Peradaban.
3. Syaiful Prayogi, S.Farm., M.Farm. selaku Ketua Program Pendidikan Farmasi Universitas Peradaban.
4. Bapak Syaiful Prayogi, S.Farm., M.Farm. selaku pembimbing I dan Ibu Rike Silpiana S.Farm., M.Farm. selaku pembimbing II yang telah banyak memberikan bimbingan dengan penuh keikhlasan dan kesabaran.
5. Bapak apt. Teguh Hary Kartono, M. Farm. dan Ibu Resa Frafela Rosmi S.Si., M.Sc. selaku Dosen Penguji I dan Dosen Penguji II yang telah memberikan saran dan masukan bagi penulis dalam penulisan skripsi ini.
6. Almarhum Ayahanda tercinta, Bapak Deden Hendriana yang telah menjadi sumber inspirasi dan kekuatan terbesar dalam setiap langkah perjalanan akademik saya. Meskipun secara fisik Ayah telah tiada, doa, kasih sayang, dan ajaran-ajaran yang telah ditanamkan senantiasa menjadi pedoman dan

motivasi bagi saya hingga saat ini. emoga skripsi ini dapat menjadi amal jariyah dan bukti bahwa setiap kebaikan yang telah Ayah tanamkan tidaklah sia-sia. Semoga Allah SWT menempatkan Almarhum Ayah di tempat yang paling mulia, dikelilingi rahmat dan kedamaian yang abadi.

7. Bidadari syurga yang hadir di dunia, Ibu Een Fariha, saya mengucapkan terima kasih yang tak terhingga kepada ibu tercinta atas segala cinta, kasih sayang, doa, kesabaran, dan pengorbanan yang telah diberikan tanpa mengenal lelah. Terima kasih karena selalu menjadi tempat pulang, sumber motivasi, dan penyemangat di setiap proses yang penulis lalui, terutama selama penyusunan skripsi ini. Tanpa doa dan dukungan Ibu, penulis tidak akan mampu menyelesaikan penelitian ini dengan baik. Semoga Allah SWT senantiasa memberikan kesehatan, umur yang berkah, dan membalas setiap kebaikan Ibu dengan pahala yang berlipat ganda.
8. Dengan penuh rasa hormat dan syukur, saya menyampaikan terimakasih yang sebesar-besarnya kepada keluarga saya, kakak saya Moch Defara Putra Hidayatullah dan Anisa Rohani, adik saya Moch. Dafikri Diaulhaq, Teman hidup saya yang selalu setia mensuport saya dalam menyusun skripsi ini, Akmal Riza Fernanda. Kebersamaan dan kehangatan keluarga besar telah menjadi sumber kekuatan yang tak ternilai, yang turut membantu saya melalui setiap proses perjalanan akademik ini. Semoga segala kebaikan yang telah diberikan dibalas dengan limpahan keberkahan dan kebahagiaan oleh Allah SWT.

9. Teman teman Badroom 3 Leni Safitri, Kurniawati, Nila Afiatun Arizqi, sahabat sedari kecil saya Sefitra Izma Syahdia, Arida Nimatur Rahmah, Anindya Novia Ramadani, teman teman ketoprak retno yang geranggotakan Ilva, Una, Silvi, Eka, Fenti dan Keti, ucapan terimakasi yang tulus saya sampaikan kepada teman-teman terdekatku, yang telah menjadi pelipur lara tempat berbagi tawa, cerita dan semangat ditengah pernatnya perjuangan ini. Terimakasih atas dukungan, candaan dan kebersamaan yang begitu berarti. Kalian adalah bagian penting dari proses ini dan kenangan bersama kalian akan selaluku kenang denagn penuh rasa syukur.
10. Teman-teman prodi Farmasi angkatan 2022 terimakasih karena telah menjadi bagian dari perjalanan ini, untuk kebersamaan, dukungan dan semangat yang senantiasa menguatkan di setiap langkah perjuangan akademik ini. Secara khusus saya sampaikan terimakasih yang mendalam kepada Ilva Maulin, teman seperjuangan dalam suka dan duka selama proses penyusunan skripsi, terutama dalam memahami lika-liku dunia *molecular docking*. Terimakasih atas semangat, bantuan dan diskusi panjang yang tidak hanya memperluas pemahaman, tetapi juga menguatkan di saat semangat mulai goyah.
11. Terkakhir saya ucapkan terima kasih kepada diri sendiri yang telah berjuang dengan penuh kesabaran, tetap kuat di tengah berbagai rintangan, serta terus percaya bahwa setiap proses akan membawa hasil yang terbaik. Terima kasih karena telah memilih untuk bangkit setiap kali merasa lelah dan tidak

menyerah hingga skripsi ini dapat diselesaikan. Semoga setiap usaha yang telah dilakukan menjadi bekal untuk menghadapi perjalanan berikutnya.

Bumiayu, Juli 2026

Penulis

NABILLA DEFIRA PUTRI M

NIM. 42122032

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL i
SURAT PERNYATAAN PENULIS ii
PENGGUNAAN KECERDASAN BUATAN (AI) iii
PERNYATAAN PENULIS iv
PERSETUJUAN SKRIPSI v
PENGESAHAN SKRIPSI vi
ABSTRACT vii
ABSTRAK viii
MOTO DAN PERSEMBAHAN ix
KATA PENGANTAR x
DAFTAR ISI xiv
DAFTAR TABEL xvi
DAFTAR GAMBAR xvii
DAFTAR LAMPIRAN xviii
BAB I PENDAHULUAN 1
A. Latar Belakang 1
C.Tujuan Penelitian 5
D.Manfaat Penelitian 6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA 8
A.Kajian Pustaka 8
B.Kajian Penelitian yang Relevan 35
C.Kerangka Pikir 36
D.Hipotesis 38
BAB III METODE PENELITIAN 39
A.Jenis Penelitian 29
B.Tempat dan Waktu Penelitian 39
C.Populasi dan Sampel Penelitian 39
D.Variabel Penelitian 40

E.Definisi Oprasional 40
F.Alat dan Bahan 41
G.Cara Kerja 45
H.Alur Penelitian 49
I.Analisis Data 50
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN 51
BAB V 87
PENUTUP 87
A.Kesimpulan 87
B. Saran 88
DAFTAR PUSTAKA 89
LAMPIRAN 99

DAFTAR TABEL

Table 4. 1 Struktur 3D Senyawa Uji 51
Table 4. 2 Struktur 3D Makromolekul 52
Table 4. 3 Prediksi Aktivitas Biologi Senyawa Uji 53
Table 4. 5 Re-docking Protein Target dengan Ligan Alami 58
Table 4. 6 Docking Kontrol Positif Tamoxifen dengan Reseptor ERa 61
Table 4. 7 Docking Kontrol Positif Trastuzumab dengan Reseptor HER2 61
Table 4. 8 Penambatan Senyawa Uji dengan Reseptor ERa 64
Table 4. 9 Penambatan Senyawa Uji dengan Reseptor HER2 65
Table 4. 10 Prediksi Herb Drug-Interction Senyawa Uji dengan Reseptor ERa .. 71
Table 4. 11 Prediksi Herb-Drug Interaction Senyawa Uji dengan Reseptor HER75
Table 4. 12 Prediksi ADMET Senyawa Uji dengan Tamoxifen..... 78
Table 4. 13 Perdiksi ADMET Senyawa Uji dengan Trastuzumab 79

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 HER2 (Human Epidermal Growth Factor Receptor 2) 10
Gambar 2. 2 Estrogen Receptor Alpha (ERa) 12
Gambar 2. 3 TNBC 13
Gambar 2. 4 Mekanisme Kerja Transtuzumab 15
Gambar 2. 5 Tanaman Temu Kunci 19
Gambar 2. 6 Senyawa Chalcon 24
Gambar 4. 1 Visualisasi 3D Preparasi Makromolekul 55
Gambar 4. 2 Visualisasi 3D Preparasi Makromolekul HER2 56
Gambar 4. 3 Visualisasi 2D dan 3D Re-docking 57
Gambar 4. 4 Visualisasi 2D dan 3D Re-docking HER2 57
Gambar 4. 5 Visualisasi 2D dan 3D Docking Trastuzumab dengan HER2 61
Gambar 4. 6 Visualisasi 2D dan 3D Docking Tamoxifen dengan ERa 62
Gambar 4. 7 Visualisasi 2D Pinostrobin 66
Gambar 4. 8 Visualisasi 2D Panduratin A 68
Gambar 4. 9 Visualisasi 2D Boesenbergin A 71

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Surat Izin Penelitian.....99
Lampiran 2 Surat Keterangan Selesai Melaksanakan Penelitian.....100
Lampiran 3 Validasi Docking.....101
Lampiran 4 Docking Kontrol Positif.....102
Lampiran 5 Penambatan Senyawa Uji.....102
Lampiran 6 Dokumentasi Penelitian.....104
Lampiran 7 Hasil Turnitin.....112
Lampiran 8 Biodata Penulis.....118