

Pustaka Pubisher

Pustaka_GALEN_Saeful+Amin.docx

 Check - No Repository 35

 Indeks A

 Australian University Kuwait

Document Details

Submission ID

trn:oid::1:3403635283

Submission Date

Nov 9, 2025, 1:55 PM GMT+4

Download Date

Nov 9, 2025, 1:59 PM GMT+4

File Name

Pustaka_GALEN_Saeful_Amin.docx

File Size

71.0 KB

11 Pages

3,412 Words

22,134 Characters

16% Overall Similarity

The combined total of all matches, including overlapping sources, for each database.

Filtered from the Report

- Bibliography

Top Sources

- 8%  Internet sources
 - 10%  Publications
 - 4%  Submitted works (Student Papers)
-

Top Sources

- 8% Internet sources
- 10% Publications
- 4% Submitted works (Student Papers)

Top Sources

The sources with the highest number of matches within the submission. Overlapping sources will not be displayed.

1	Publication	Saeful Amin, Elsa Farhatunnisa, Khoirul Hawari, Lisa Fitriani, Raisya Ismah Fadlill...	2%
2	Publication	Rolita Efriani, Suci Sholihat, Eliana Eliana, Rina Rina. "Faktor-Faktor yang Mempen...	1%
3	Publication	Saeful Amin, Neng Sarah Nurhanifah, Isfahani Maulidah Putri, Rd Dina Siti Murdi...	1%
4	Student papers	Universitas 17 Agustus 1945 Semarang	<1%
5	Internet	irje.org	<1%
6	Publication	Basim Othman, Saba Beigh, Mohammad A. Albanghali, Abdulmajeed A. A. Sindi et...	<1%
7	Internet	jurnal.unpad.ac.id	<1%
8	Internet	www.mdpi.com	<1%
9	Student papers	Universitas Diponegoro	<1%
10	Internet	penerbitgoodwood.com	<1%
11	Publication	Saeful Amin, Muhammad Riffa Firdaus, Fawwaz Daniswara, Giri Guntara, Muham...	<1%

12	Publication	Saeful Amin, Yuni Yunarsih, Intan Ririhani, Yunisa Miraz, Nabila Amelia, Muhama...	<1%
13	Internet	kankerpayudara.co.id	<1%
14	Student papers	Universitas PGRI Semarang	<1%
15	Internet	conference.unsri.ac.id	<1%
16	Publication	Lia Listya Lily, Gerald Marcelino Kalangi, Gracea Sintike Manufandu, Santi Anugr...	<1%
17	Internet	journal.ubb.ac.id	<1%
18	Publication	Mitahul Rahmah, Dina Hajja Ristianti, Sumarto Sumarto. "Konseling Individu den...	<1%
19	Internet	jha.sums.ac.ir	<1%
20	Internet	rep.polessu.by	<1%
21	Publication	Saeful Amin, Gina Fauziah, Nurlaila Aditia Putri, Farihatul Azizah. "Analisis In Silic...	<1%
22	Internet	garuda.kemdikbud.go.id	<1%
23	Internet	joecy.org	<1%
24	Internet	swa.co.id	<1%
25	Internet	www.jurnal-adaikepri.or.id	<1%

26	Publication	Saeful Amin, Resi Aulia Azhari, Fauzia Rifany Nurmaliya, Lexsa Pujawati4, Siti Ha...	<1%
27	Student papers	Universitas Negeri Surabaya The State University of Surabaya	<1%
28	Internet	bidhuan.tumblr.com	<1%
29	Internet	erepository.uwks.ac.id	<1%
30	Internet	id.scribd.com	<1%



Eksplorasi Potensi Senyawa Alam dalam Aktivitas Antikanker Payudara: Pendekatan IN SILICO

Saeful Amin

Program Studi Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Inggit Suci Listya

Program Studi Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada

Alamat : Jl. Mashudi No.20 Kel Kahuripan Tawang, Kota Tasikmalaya, Jawa Barat 46115

Korespondensi penulis: inggitsuci09@gmail.com

No. WA Aktif : 082126810798

Abstract. Breast cancer is one of the leading causes of death in women worldwide, including in Indonesia, with a prevalence rate reaching approximately 16.6% of total new cancer cases. The limited effectiveness of conventional therapies due to the emergence of drug resistance, severe side effects, and high treatment costs encourage the need for alternative therapies that are safer, more efficient, and affordable. This study aims to examine the potential of natural compounds as anti-breast cancer agents through an in silico approach. The method applied is a literature study with descriptive analysis of the results of previous studies using molecular docking, virtual screening, and ADMET prediction techniques. The results of the study indicate that several natural compounds such as Berberine, Fisetin, Ellagic Acid, Curcumin, Kaempferol, and Withaferin A have strong binding affinity (-7.0 to -13.7 kcal/mol) to breast cancer target proteins, including EGFR, BCL-2, and PKC- α . Furthermore, molecular dynamics simulations indicated good complex stability and a pharmacokinetic profile that supports its bioactive potential. However, bioavailability and biological validation remain major challenges. Overall, the in silico approach has proven capable of accelerating the identification of natural product-based anticancer drug candidates and providing a foundation for further in vitro and in vivo research.

Keywords: Compound, Anticancer, Breast, In Silico

Abstrak. Kanker payudara menjadi salah satu penyebab utama kematian pada wanita di seluruh dunia, termasuk di Indonesia, dengan tingkat prevalensi mencapai sekitar 16,6% dari total kasus kanker baru (Marubeni, 2023). Keterbatasan efektivitas terapi konvensional akibat munculnya resistensi obat, efek samping yang berat, serta biaya pengobatan yang tinggi mendorong perlunya alternatif terapi yang lebih aman, efisien, dan terjangkau. Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji potensi senyawa alami sebagai agen antikanker payudara melalui pendekatan in silico. Metode yang diterapkan berupa

Received Desember 30, 2022; Revised April 30, 2023; Accepted Agustus 30, 2023

*Corresponding author, inggitsuci09@gmail.com

Eksplorasi Potensi Senyawa Alam dalam Aktivitas Antikanker Payudara: Pendekatan IN SILICO

studi pustaka dengan analisis deskriptif terhadap hasil penelitian terdahulu yang menggunakan teknik molecular docking, virtual screening, dan prediksi ADMET. Hasil telaah menunjukkan bahwa beberapa senyawa alami seperti Berberine, Fisetin, Ellagic Acid, Kurkumin, Kaempferol, dan Withaferin A memiliki afinitas ikatan yang kuat ($-7,0$ hingga $-13,7$ kcal/mol) terhadap protein target kanker payudara, di antaranya EGR, BCL-2, dan PKC- α . Selain itu, simulasi dinamika molekuler mengindikasikan stabilitas kompleks yang baik serta profil farmakokinetik yang mendukung potensi bioaktifnya. Namun, isu bioavailabilitas dan validasi biologis masih menjadi tantangan utama. Secara keseluruhan, pendekatan in silico terbukti mampu mempercepat proses identifikasi kandidat obat antikanker berbasis bahan alam serta menjadi landasan bagi penelitian lanjutan secara in vitro dan in vivo.

Kata kunci: Senyawa, Antikanker, Payudara, In Silico

LATAR BELAKANG

Kanker payudara merupakan salah satu jenis kanker dengan tingkat prevalensi tertinggi di dunia, khususnya pada populasi wanita. Berdasarkan laporan GLOBOCAN, jenis kanker ini menyumbang proporsi signifikan dari total kasus kanker baru secara global, termasuk di Indonesia. Tingginya angka kejadian dan kematian akibat kanker payudara menjadikannya persoalan kesehatan masyarakat yang krusial, yang memerlukan langkah-langkah strategis seperti peningkatan kesadaran, deteksi dini, serta upaya pengobatan yang lebih efektif dan terjangkau. Di Indonesia sendiri, kanker payudara menduduki peringkat pertama sebagai jenis kanker dengan kasus terbanyak, yaitu sekitar 16,6% dari seluruh kasus kanker baru yang dilaporkan, sekaligus menjadi salah satu penyebab utama kematian akibat kanker. Sebagian besar pasien yang datang untuk berobat telah berada pada stadium lanjut, yakni sekitar 68–73%, sebagaimana tercatat di sejumlah rumah sakit rujukan nasional. Kondisi ini berkaitan erat dengan rendahnya tingkat pengetahuan masyarakat tentang kanker, keterbatasan fasilitas kesehatan, dan kurangnya akses terhadap pemeriksaan dini.

Pilihan terapi bagi penderita kanker payudara saat ini mencakup tindakan pembedahan, kemoterapi, terapi hormon, terapi target, serta radioterapi. Meskipun metode tersebut telah berhasil meningkatkan angka harapan hidup, hambatan besar masih muncul dalam bentuk resistensi obat, efek samping berat, serta biaya pengobatan yang tinggi. Selain itu, beberapa subtype kanker payudara seperti Triple Negative Breast Cancer (TNBC) yang tidak mengekspresikan reseptor hormon atau HER2 memiliki opsi pengobatan yang sangat terbatas, sehingga tingkat keberhasilannya pun lebih rendah

24 dibandingkan sub tipe lainnya. Sehingga dalam upaya mengatasi keterbatasan terapi tersebut, senyawa alami telah lama dijadikan sumber potensial dalam penemuan obat antikanker. Berbagai jenis tanaman dan ekstrak bioaktif terbukti memiliki aktivitas biologis seperti menghambat proliferasi sel, memicu apoptosis, serta mengurangi kemampuan sel kanker untuk bermigrasi dan bermetastasis. Meskipun demikian, proses isolasi, pengujian biologis (in vitro maupun in vivo), serta pengembangan farmakologinya sering kali memerlukan waktu dan biaya yang besar.

8 Salah satu pendekatan modern yang kini banyak digunakan dalam tahap awal penemuan obat adalah metode in silico. Teknik ini meliputi molecular docking, virtual screening, Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR), prediksi ADMET, serta simulasi dinamika molekuler, yang memungkinkan analisis interaksi antara senyawa kimia dan target protein secara cepat dan efisien tanpa memerlukan eksperimen laboratorium langsung. Sejumlah penelitian dalam negeri menunjukkan hasil yang menjanjikan, misalnya studi terhadap flavonoid dari *Ageratum conyzoides* yang menemukan bahwa senyawa fisetin memiliki energi ikatan rendah ($-8,9$ kcal/mol) terhadap reseptor EGFR dengan profil ADMET yang baik. Penelitian lain juga mengidentifikasi analog kurkumin yang memiliki kestabilan interaksi tinggi dan energi bebas ikatan rendah terhadap sel kanker payudara MCF-7 berdasarkan analisis QSAR dan molecular dynamics.

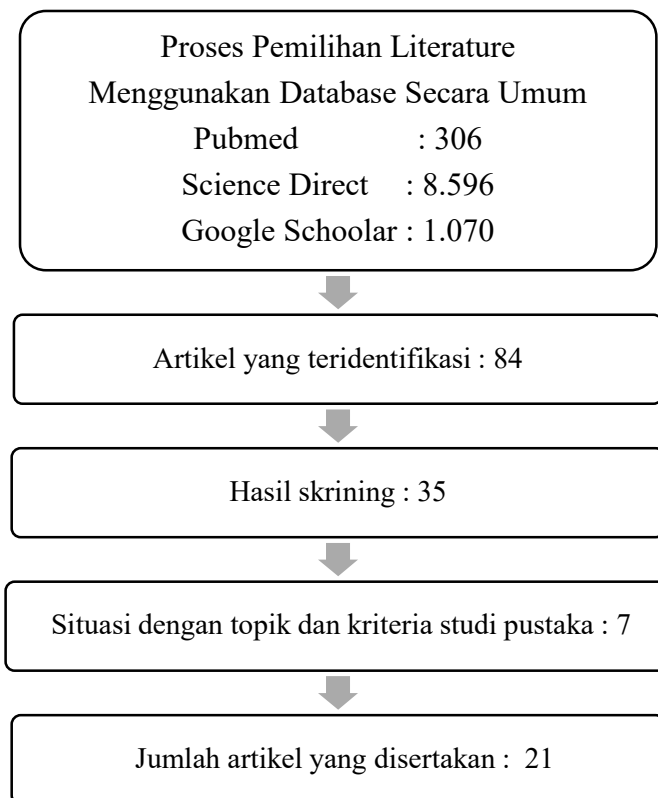
11 Kendati demikian, masih terdapat berbagai tantangan dalam pengembangan riset berbasis in silico. Banyak senyawa dengan potensi antikanker tinggi belum dieksplorasi lebih mendalam terhadap berbagai sub tipe kanker payudara, termasuk TNBC dan HER2 positif. Selain itu, validasi hasil penelitian in silico melalui uji biologis in vitro maupun in vivo masih sangat terbatas, sehingga efektivitas dan keamanan senyawa tersebut belum dapat dipastikan. Faktor lain seperti toksisitas, bioavailabilitas, serta karakteristik farmakokinetik juga menjadi aspek penting yang memerlukan perhatian lebih lanjut. Sehingga dengan mempertimbangkan hal tersebut, eksplorasi senyawa alam menggunakan pendekatan in silico yang lebih sistematis menjadi kebutuhan mendesak. Kajian ini mencakup proses penyaringan senyawa bioaktif baru, pemodelan interaksi dengan target-target utama kanker payudara (seperti reseptor hormon, HER2, EGFR, dan MMP-9), serta evaluasi mendalam terhadap profil ADMET. Pendekatan tersebut dapat

Eksplorasi Potensi Senyawa Alam dalam Aktivitas Antikanker Payudara: Pendekatan IN SILICO

mempercepat proses identifikasi kandidat obat yang aman dan efektif, menekan biaya riset, serta membuka peluang terapi alternatif bagi pasien dengan keterbatasan respons terhadap pengobatan konvensional. Dengan dukungan data epidemiologis nasional, penelitian ini memiliki signifikansi tinggi bagi pengembangan ilmu dan praktik pengobatan di Indonesia maupun negara berkembang lainnya.

METODE PENELITIAN

Tahapan kajian ini disusun secara sistematis agar proses penelusuran literatur dan analisis data dapat dilakukan secara terarah dan konsisten. Setiap tahap mencakup penentuan topik kajian, pengumpulan sumber pustaka, penyaringan artikel yang relevan, hingga analisis hasil menggunakan pendekatan in silico. Untuk memperjelas alur proses kajian yang dilakukan, diagram alir tahapan kajian disajikan pada Gambar 1 berikut.



Gambar 1. Diagram alir tahapan penelitian yang menggambarkan proses penelusuran literatur, seleksi data, serta analisis hasil menggunakan pendekatan in silico

Kajian ini dilakukan menggunakan metode studi pustaka (literature review) dengan pendekatan kualitatif deskriptif yang bertujuan untuk mengkaji dan menafsirkan berbagai hasil penelitian terdahulu mengenai potensi senyawa alam sebagai agen

antikanker payudara melalui metode in silico. Pendekatan ini memberikan gambaran menyeluruh mengenai perkembangan penelitian terbaru, jenis senyawa bioaktif yang berpotensi, serta mekanisme interaksi molekuler dengan target protein yang berperan dalam terapi kanker payudara. Proses penelusuran literatur dilakukan melalui beberapa basis data ilmiah seperti PubMed, ScienceDirect, SpringerLink, dan Google Scholar dengan menggunakan kata kunci “Senyawa”, “Anticancer”, “Payudara”, dan “In Silico” untuk periode publikasi tahun 2020–2025. Pemilihan artikel difokuskan pada penelitian yang menelaah aktivitas antikanker dari senyawa alam menggunakan pendekatan komputasional, khususnya terhadap target protein seperti EGFR, HER2, ER α , PI3K, MMP-9, dan Bcl-2. Artikel yang dipilih juga memuat data kuantitatif berupa nilai energi ikatan (binding affinity), interaksi residu aktif, serta hasil prediksi ADMET dan toksisitas yang menjadi indikator efektivitas serta keamanan molekuler. Analisis data dilakukan secara deskriptif melalui metode analisis isi (content analysis) dengan membandingkan hasil dari setiap penelitian untuk menemukan kesamaan, perbedaan, serta kecenderungan yang muncul terkait jenis senyawa, target biologis, nilai afinitas ikatan, dan profil farmakokinetik. Secara umum, penelitian ini meliputi tahap perumusan topik, pencarian dan seleksi literatur yang relevan, ekstraksi data, serta analisis mendalam untuk menemukan hubungan antarvariabel penelitian. Hasil akhir berupa sintesis ilmiah yang menjelaskan potensi dan mekanisme kerja senyawa alam terhadap kanker payudara melalui pendekatan in silico, yang diharapkan dapat menjadi dasar teoritis bagi penelitian lanjutan secara in vitro maupun in vivo dalam pengembangan obat antikanker berbasis bahan alam.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Berdasarkan hasil kajian dari beberapa penelitian yang relevan, diperoleh data mengenai potensi berbagai senyawa alam yang memiliki aktivitas antikanker payudara melalui pendekatan in silico. Data tersebut meliputi jenis senyawa yang diuji, target protein, nilai afinitas ikatan, serta hasil analisis farmakokinetik. Rangkuman hasilnya dapat dilihat pada Tabel 1.

Tabel 1. Hasil penelitian in silico senyawa alam terhadap target protein kanker payudara

No	Referensi Penelitian & Tahun	Senyawa yang Dianalisis	Target Protein	Nilai Afinitas Ikatan	Jenis Interaksi / Residus Utama	Temuan ADMET / Profil	Ringkasan Hasil Utama
----	------------------------------	-------------------------	----------------	-----------------------	---------------------------------	-----------------------	-----------------------

1

Eksplorasi Potensi Senyawa Alam dalam Aktivitas Antikanker Payudara: Pendekatan IN SILICO

				(kcal/mol)		Farmakokinetik	
1	B. Othman et al., 2025	Berberine	BCL-2	-9.3	Ikatan kuat pada sisi aktif protein antiapoptotik	Stabilitas farmakokinetik tinggi	Menunjukkan potensi menekan pertumbuhan sel kanker melalui penghambatan BCL-2
		Ellagic Acid	PD-L1	-9.8	Interaksi hidrogen yang konsisten dengan residu aktif PD-L1	Menunjukkan bioavailabilitas baik	Kandidat potensial sebagai inhibitor imunomodulator untuk terapi kanker payudara
		Curcumin, Withaferin A	CDK4/6 dan FGFR	-8.5 hingga -9.0 (rata-rata)	Interaksi kuat pada kantung ATP-binding domain	ADMET mendukung tingkat penyerapan yang tinggi	Berpotensi sebagai molekul multi-target untuk terapi kanker
2	P. Jiwamurwa et al., 2024	Fisetin (dari <i>Ageratum conyzoides</i> L.)	EGFR	-8.9	Interaksi dengan Met765, Val702, Leu694, dan Leu820 (hinge region)	Absorpsi dan toksisitas dalam batas aman	Kandidat inhibitor EGFR alami dengan aktivitas antikanker menjanjikan
3	M. E. M. Saeed et al., 2022	50 Derivat Kurkumin	EGFR dan NF-κB	EGFR: -12.12 s.d. -7.34; NF-κB: < -10	Ikatan hidrogen dan π-π stacking dengan residu aktif	Sebagian besar derivat memiliki stabilitas molekuler tinggi	Modifikasi struktur kurkumin meningkatkan kekuatan dan selektivitas ikatan terhadap target kanker
4	V. L. Maruthanila et al., 2022	Chlorogenic acid, Myricetin, Quercetin, Isorhamnetin, Catechin (dari <i>Carica papaya</i>)	Reseptor estrogen & aromatase	Lebih tinggi dari Tamoxifen & Letrozole	Berikatan pada domain hormon reseptor	Menunjukkan profil absorpsi yang baik	Memiliki potensi besar sebagai penghambat alami aktivitas hormon estrogen
5	A. S. Salsabila et al., 2023	Myricetin	PKC-α	-8.49	Berinteraksi dengan residu aktif domain C1 PKC	Profil farmakokinetik optimal	Inhibitor kuat terhadap PKC-α
		Quercetin	PKC-α	-7.94	Membentuk ikatan hidrogen dengan residu polar	Absorpsi sedang	Dapat digunakan sebagai agen pendukung terapi antikanker

		Kaempferol	PKC- α	-7.75	Interaksi hidrofobik yang stabil	Absorpsi usus dan permeabilitas tinggi	Kandidat unggulan untuk dikembangkan dalam formulasi oral
6	A. Jamal, <i>J. Pioneer Med. Sci.</i> , 2025	TIP012988, TIP009544, TIP013002 (senyawa dari jahe)	EGFR	-7.244; -6.983; -6.557	Terikat pada kantung ATP-binding EGFR	Memiliki profil toksisitas rendah	Efektivitasnya melampaui inhibitor komersial seperti Erlotinib
7	P. Biswas et al., <i>ICE Conf. Innov. Comput. Eng.</i> , 2025	Withaferin A + Garcinol	BCL-2 dan AKT-1	BCL-2: -11.88 $\pm$ 0.12; AKT-1: -13.74 $\pm$ 0.08	Ikatan hidrogen dan hidrofobik yang kuat	Kompleks stabil selama simulasi MD 100 ns (RMSD/RMSF konstan)	Menunjukkan efek sinergis dalam menghambat mekanisme kelangsungan hidup sel kanker

Penelitian in silico yang berjudul “Comprehensive Pharmacokinetic Profiling and Molecular Docking Analysis of Natural Bioactive Compounds Targeting Oncogenic Biomarkers in Breast Cancer” meneliti empat senyawa alam utama Berberine, Curcumin, Withaferin A, dan Ellagic Acid terhadap target protein kanker payudara seperti BCL-2, PD-L1, CDK4/6, dan FGFR. Hasil analisis menunjukkan bahwa Berberine memiliki afinitas ikatan yang cukup kuat dengan nilai 9,3 kcal/mol terhadap BCL-2, sedangkan Ellagic Acid menunjukkan nilai 9,8 kcal/mol terhadap PD-L1. Nilai ini menandakan kemampuan kedua senyawa tersebut dalam menstabilkan interaksi dengan protein onkogenik yang berperan penting dalam proliferasi sel kanker payudara.

Penelitian lanjutan terhadap tanaman *Ageratum conyzoides* L. mengungkapkan bahwa senyawa fisetin, yang termasuk dalam kelompok flavonoid, memiliki energi ikatan sebesar 8,9 kcal/mol terhadap EGFR. Interaksi fisetin terjadi dengan residu-residu aktif seperti Met765, Val702, Leu694, dan Leu820 di daerah engsel (hinge region) EGFR. Hasil analisis farmakokinetik (ADMET) menunjukkan bahwa fisetin memiliki profil absorpsi dan toksisitas yang baik, sehingga potensial dikembangkan sebagai kandidat terapi antikanker payudara berbasis senyawa alam. Selanjutnya, penelitian yang menelaah 50 derivat kurkumin terhadap EGFR dan NF- κ B menemukan bahwa beberapa derivat memperlihatkan nilai energi ikatan yang sangat rendah, berkisar antara $12,12 \pm 0,21$ hingga $7,34 \pm 0,07$ kcal/mol untuk EGFR, serta di bawah -10 kcal/mol untuk NF- κ B. Hasil ini menunjukkan bahwa modifikasi struktur kimia kurkumin dapat meningkatkan kekuatan ikatan terhadap protein target sekaligus meningkatkan selektivitas molekul terhadap sel kanker.

Eksplorasi Potensi Senyawa Alam dalam Aktivitas Antikanker Payudara: Pendekatan IN SILICO

Pada penelitian yang berfokus pada Carica pepaya, lima senyawa utama yaitu Chlorogenic acid, Myricetin, Quercetin, Isorhamnetin, dan Catechin menunjukkan hasil skor glide docking yang tinggi terhadap target reseptor estrogen dan aromatase. Beberapa di antaranya bahkan memiliki nilai yang lebih baik dibandingkan standar klinis seperti Tamoxifen dan Letrozole. Hal ini mengindikasikan potensi besar senyawa alami pepaya dalam menghambat aktivitas hormon yang memicu pertumbuhan sel kanker payudara. Penelitian terhadap Moringa oleifera juga memperlihatkan hasil yang signifikan. Tiga senyawa fenolik, yaitu Myricetin, Quercetin, dan Kaempferol, menunjukkan kemampuan tinggi dalam menghambat Protein Kinase C alpha (PKC- α). Nilai binding energy yang diperoleh adalah 8,49 kcal/mol untuk Myricetin, 7,94 kcal/mol untuk Quercetin, dan 7,75 kcal/mol untuk Kaempferol. Dari segi farmakokinetik, Kaempferol memiliki keunggulan dalam hal absorpsi usus dan permeabilitas dibanding dua senyawa lainnya, menandakan potensi lebih besar untuk pengembangan formulasi oral.

Dalam penelitian lain, senyawa-senyawa yang berasal dari jahe juga diuji terhadap EGFR dan menunjukkan hasil yang menjanjikan. Tiga senyawa dengan kode TIP012988, TIP009544, dan TIP013002 memiliki skor docking masing-masing sebesar 7,244; 6,983; dan 6,557 kcal/mol, bahkan lebih baik dibandingkan inhibitor komersial seperti Erlotinib. Hal ini menegaskan potensi fitokimia jahe sebagai sumber alternatif inhibitor EGFR alami yang efektif. Kombinasi senyawa Withaferin A dan Garcinol juga diuji terhadap protein BCL-2 dan AKT-1, menghasilkan afinitas ikatan yang sangat tinggi, yakni $11,88 \pm 0,12$ kcal/mol dan $13,74 \pm 0,08$ kcal/mol secara berurutan. Nilai tersebut lebih rendah dibanding inhibitor komersial seperti Venetoclax, yang menunjukkan bahwa kombinasi kedua senyawa ini dapat memberikan efek sinergis dalam menghambat mekanisme kelangsungan hidup sel kanker. Simulasi dinamika molekuler (MD) selama 100 nanodetik (ns) memperkuat hasil docking dengan menunjukkan stabilitas kompleks ligan-protein yang tinggi. Dalam simulasi terhadap Ellagic Acid dan Berberine, interaksi hidrogen dengan residu kunci tetap bertahan sepanjang durasi simulasi. Parameter RMSD dan RMSF yang stabil mengindikasikan bahwa kedua senyawa ini mampu mempertahankan posisi optimal dalam kantung aktif protein, sehingga meningkatkan kemungkinan efektivitas biologisnya.

Hasil analisis ADME dan toksisitas menunjukkan bahwa meskipun senyawa-senyawa tersebut memiliki energi ikatan yang tinggi, tantangan tetap muncul pada aspek bioavailabilitas dan stabilitas metabolic. Sebagai contoh, meski derivat kurkumin dan senyawa seperti Quercetin memiliki skor docking yang unggul, beberapa menunjukkan absorpsi yang rendah dan tingkat metabolisme yang tinggi, yang dapat membatasi efektivitasnya dalam sistem biologis. Oleh karena itu, penelitian lanjutan diperlukan untuk meningkatkan stabilitas dan kelarutan senyawa-senyawa ini. Hasil analisis farmakokinetik melalui prediksi ADMET juga mengindikasikan bahwa sebagian besar senyawa alam ini memiliki karakteristik penyerapan dan distribusi yang menguntungkan, meskipun aspek bioavailabilitas dan potensi toksisitas masih perlu diuji lebih lanjut. Hal ini menunjukkan bahwa hasil *in silico* perlu dikonfirmasi dengan pengujian biologis untuk memastikan efektivitas dan keamanan pada sistem tubuh manusia.

11 Secara umum, penelitian ini membuktikan bahwa pendekatan *in silico* merupakan langkah awal yang efisien dan ekonomis dalam proses penemuan kandidat obat antikanker berbasis bahan alam. Pendekatan ini mampu mempercepat tahap skrining senyawa sebelum dilakukan pengujian laboratorium (*in vitro*) maupun pada hewan dan manusia (*in vivo*). Temuan ini juga membuka peluang besar bagi pengembangan obat herbal modern di masa depan, khususnya dari kekayaan hayati Indonesia yang sangat beragam dan potensial. Dengan mengintegrasikan teknologi komputasi modern dan sumber daya alam lokal, diharapkan tercipta inovasi obat kanker yang lebih efektif, aman, dan terjangkau bagi masyarakat luas.

KESIMPULAN DAN SARAN

12 Secara keseluruhan, seluruh temuan ini memperlihatkan bahwa senyawa alami seperti Berberine, Ellagic Acid, Fisetin, derivat Kurkumin, Myricetin, Kaempferol, serta kombinasi Withaferin A dan Garcinol, memiliki potensi besar sebagai kandidat terapi antikanker payudara. Potensi ini didukung oleh nilai afinitas ikatan yang kompetitif terhadap target seperti EGFR, BCL-2, dan PKC- α , serta profil farmakokinetik yang menjanjikan. Meski sebagian besar hasil masih berada pada tahap pra-klinis komputasional, pendekatan *in silico* ini telah memberikan dasar ilmiah yang kuat untuk melanjutkan ke tahap *in vitro* dan *in vivo*, sekaligus membuka peluang pengembangan obat antikanker berbasis bahan alam yang lebih aman dan efektif di masa depan.

3

DAFTAR PUSTAKA

- Ulin Nafi S, Desy Putriningtyas. Faktor Yang Memengaruhi Kejadian Hipertensi Masyarakat Pesisir (Studi Pada Masyarakat Wilayah Kerja Puskesmas Kedung Ii Jepara). 2023;12:53–60. Available From: <http://Ejournal3.Undip.Ac.Id/Index.Php/Jnc/>
- M. A. Majid, A. Achmad, H. A. Holik, and A. H. S. Kartamihardja, “Breast Cancer Awareness among Bandung Adolescents,” J. Pengabd. Kpd. Masy. (Indonesian J. Community Engag., vol. 8, no. 1, p. 35, 2022, doi: 10.22146/jpkm.60270
- Marubeni, “Marubeni Beraksi: Mempromosikan Kesadaran dan Skrining Kanker Payudara di Indonesia,” Marubeni Corporation, 2023. https://www.marubeni.com/en/news/2023/info/00030.html?utm_source
- W. Gautama, “Breast Cancer in Indonesia in 2022: 30 Years of Marching in Place,” Indones. J. Cancer, vol. 16, no. 1, p. 1, 2022, doi: 10.33371/ijoc.v16i1.920.
- M. Shofi, “Studi In Silico Senyawa Kuarsetin Daun Kencana Ungu (*Ruellia tuberosa* L.) Sebagai Agen Antikanker Payudara,” J. Sint. Penelit. Sains, Terap. dan Anal., vol. 2, no. 1, pp. 1–9, 2022, doi: 10.56399/jst.v2i1.13.
- S. Amin, A. T. Abidin, and M. Fathurohman, “Prediksi In Silico Aktivitas Antikanker Payudara dari Metabolit Sekunder Tanaman Babandotan (*Ageratum conyzoides* L.),” vol. 4, pp. 267–282, 2024.
- W. A. Harahap, D. Khambri, S. S. Panigoro, and M. Z. A. Hafiz, “Mutation of BRCA1/2 Gene in Premenopausal Triple-Negative Breast Cancer Patients in West Sumatera,” Indones. J. Cancer, vol. 19, no. 1, pp. 72–79, 2025, doi: 10.33371/ijoc.v19i1.1255.
- S. Amin, R. N. Azijah, and F. R. Gunawan, “Eksplorasi Senyawa Alami sebagai Lead Antikanker Payudara dengan Pendekatan In Silico,” J. Ilmu Medis Indones., vol. 4, no. 1, pp. 63–74, 2024, doi: 10.35912/jimi.v4i1.4560.
- S. Amin, L. D. Sutaryat, L. U. Yuniar, and Y. Haryana, “Kajian Literatur : Eksplorasi Metabolit Sekunder Tanaman Lokal Indonesia sebagai Terapi Alami Kanker Payudara,” J. Innov. Creat., vol. 5, no. 2, pp. 231–239, 2025, doi: 10.31004/joecy.v5i2.163.
- S. Amin, R. Aryanti, and A. Y. Aprilia, “Studi In Silico Senyawa yang Terkandung dalam Kulit Buah Manggis (*Garcinia mangostana* L.) Sebagai Antikanker Payudara,” Pros. Semin. Nas. Disem. Penelit., vol. 3, no. September, pp. 2964–6154, 2023, [Online]. Available: <https://zlab.umassmei>
- D. I. Dinata, F. Z. Muttaqin, J. J. Sodik, A. M. Irfani, and Y. N. Binawan, “In Silico Study of Flavonoid Derivative Compounds against ER- α as Anticancer,” Indones. J. Pharm. Sci. Technol., vol. 12, no. 2, pp. 166–175, 2025, [Online]. Available: <https://doi.org/10.24198/ijpst.v12s2.60035>
- P. Jiwamurwa, P. Tjitda, T. D. Wahyuningsih, and F. O. Nitbani, “In Silico Insight of Natural Compounds in *Ageratum Conyzoides* L as Anti Breast Cancer Candidate by Molecular Docking Against EGFR,” J. Akta Kim. Indones. Chim. Acta, vol. 17, no. 2, pp. 63–74, 2024, doi: <http://dx.doi.org/10.70561/ica.v17i2.35928>.
- N. Frimayanti, A. Zamri, and Y. Eryanti, “In Silico Analysis for Exploring the Potential

- Inhibitors Against Breast Cancer (MCF7) Using Curcumin Analogue Compounds,” J. Kim. Sains dan Apl. Vol 27, No 6 Vol. 27 Issue 6 Year 2024, vol. 27, no. 6, pp. 250–257, 2024, doi: 10.14710/jksa.27.6.250-257.
- S. Noer and M. F. Khairullah, “Studi In-Silico Senyawa Luteolin sebagai Kandidat Obat Antikanker Payudara,” Semin. Nas. Sains, vol. 1, no. 1, pp. 16–22, 2023.
- S. Amin et al., “Studi Komputasi Potensi Anti-Kanker Payudara dari Senyawa Bioaktif Daun Belimbing Wuluh,” Pros. Semin. Nas. Disem. Penelit., vol. 4, pp. 317–331, 2024.
- M. R. Fadli, “Memahami Desain Metode Penelitian Kualitatif,” Humanika, vol. 21, no. 1, pp. 33–54, 2021, doi: 10.21831/hum.v21i1.38075.
- B. Othman et al., “Comprehensive pharmacokinetic profiling and molecular docking analysis of natural bioactive compounds targeting oncogenic biomarkers in breast cancer,” Sci. Rep., vol. 15, no. 1, p. 5426, Feb. 2025, doi: 10.1038/s41598-024-84401-4.
- M. E. M. Saeed et al., “In Silico and In Vitro Screening of 50 Curcumin Compounds as EGFR and NF- κ B Inhibitors,” International Journal of Molecular Sciences, vol. 23, no. 7, 2022. doi: 10.3390/ijms23073966.
- V. L. Maruthanila, R. Elancheran, and S. Mirunalini, “In silico Approach and Molecular Docking Studies of Potent Bioactive Compounds of Carica papaya as Anti-breast Cancer Agents,” Curr. Comput. Aided. Drug Des., vol. 18, no. 3, pp. 196–212, 2022, doi: 10.2174/1573409918666220519112027.
- A. S. Salsabila, R. Z. Safira, A. R. Nugraha, D. Wulandari, R. Qaivani, and W. A. Sari, “Studi In Silico Senyawa dalam Daun Kelor (*Moringa oleifera* L.) sebagai Inhibitor Protein Kinase C Alpha pada Kanker Payudara,” Indones. J. Biol. Pharm., vol. 3, no. 3, p. 154, 2023, doi: 10.24198/ijbp.v3i3.46289.
- A. Jamal, “In-silico Identification of the Novel Anti EGFR Compounds from Ginger Through Virtual Screening and Molecular Docking Analysis,” J. Pioneer. Med. Sci., vol. 14, no. Special Issue 1, pp. 232–239, 2025, doi: 10.47310/jpms202514s0130.
- P. Biswas, D. Mathur, J. Dinesh, H. K. Dinesh, and B. M. A. Desai, “Computational Analysis using Multi-ligand Simultaneous Docking of Withaferin A and Garcinol Reveals Enhanced BCL-2 and AKT-1 Inhibition,” ICE 2025 - Int. Conf. Innov. Comput. Eng., 2025, doi: 10.1109/ICE63309.2025.10984324.