

UNIVERSITAS AISYIYAH PALEMBANG
FAKULTAS KESEHATAN DAN TEKNOLOGI
PROGRAM STUDI FARMASI

Skripsi, 13 Agustus 2025

Dylla Lutfia Azzahra

**EKSPLORASI SENYAWA POTENSIAL ANTI KANKER PARU DARI EKSTRAK DAUN
KEMANG (*Mangifera caesia* J.) DENGAN METODE *IN SILICO***

XX, 109 Halaman, 18 Tabel, 16 Gambar, 18 Daftar Singkatan, 15 Lampiran

ABSTRAK

Latar belakang : Kanker paru-paru (*bronchogenic carcinomas*) merupakan suatu keganasan yang berasal dari dalam jaringan epitel paru dan saluran udara *broncheal*. pengobatan kanker seperti kemoterapi dapat meningkatkan efektivitas terapi, tetapi pasien tetap menghadapi dampak signifikan dari penyakit dan pengobatannya. Oleh karena itu, perlu dicari obat efektif, efek samping yang relatif rendah dan harga yang relatif murah. Salah satunya menggunakan bahan alam seperti daun kemang (*mangifera kemanga* J.). **Tujuan :** Penelitian ini dimaksudkan untuk menyelidiki bahan aktif utama dan mekanisme yang melibatkan *Mangifera caesia* J. dalam penyembuhan kanker paru menggunakan pendekatan *network pharmacology* dan *molecular docking*. **Metode :** Penelitian eksperimental dengan rancangan komputasi *cloud computing*. Penelitian ini meliputi penyiapan ekstrak (pengambilan sampel, pembuatan simplisia, dan pembuatan ekstrak), analisis senyawa fitokimia dengan LC-HRMS. Analisis *in silico* berupa perangkat lunak meliputi Cytoscape 3.8.2, Autodock Vina 1.2.3, Mgltools 1.5.7, OpenBabel 2.4.1, Git-Bash, LigPlot, dan PyMOL. **Hasil :** Hasil dari *network pharmacology* mengidentifikasi senyawa *staurosporine*, *methionine*, dan *tyrosin* sebagai senyawa yang berpotensi dalam penyembuhan kanker paru. Target protein utama dalam penyembuhan meliputi GAPDH, AKT1, EGFR, SCR, dan TP53. Hasil *molecular docking* menunjukkan senyawa *myricetin*, *quercetin*, dan *naringenin* memiliki aktivitas biologis yang sama dengan senyawa pembanding (gefitinib) dalam penyembuhan kanker paru dengan cara menghambat dan menginhibisi reseptor GAPDH, AKT1, EGFR, SCR, dan TP53. **Kesimpulan :** Berdasarkan uraian diatas dapat disimpulkan bahwa senyawa *myricetin*, *quercetin*, dan *naringenin* memiliki aktivitas biologis yang sama dengan senyawa pembanding (gefitinib) dalam penyembuhan kanker paru.

Kata Kunci: *Mangifera caesia*, kanker paru, penyembuhan kanker, *network pharmacology*, *molecular docking*.

UNIVERSITY 'AISYIYAH PALEMBANG
FACULTY OF HEALTH AND TECHNOLOGY
PHARMACY STUDY PROGRAM

Skripsi, 13 Agustus 2025

Dylla Lutfia Azzahra

EXPLORATION OF POTENTIAL ANTI-LUNG CANCER COMPOUNDS
FROM KEMANG LEAF EXTRACT (*Mangifera caesia* J.) USING THE *IN SILICO*
METHOD.

XX, 109 Pages, 14 Tables, 15 Figures, 18 Abbreviations, 15 Appendices

ABSTRACT

Background: Lung cancer (bronchogenic carcinomas) is a malignancy originating from the epithelial tissue of the lungs and bronchial airways. Cancer treatments such as chemotherapy can increase the effectiveness of therapy, but patients still face significant impacts from the disease and its treatment. Therefore, it is necessary to find effective drugs, relatively low side effects and relatively low prices. One of them uses natural ingredients such as kemang leaves (*Mangifera kemanga* J.). **Objective:** This study is intended to investigate the main active ingredients and mechanisms involving *Mangifera caesia* J. in curing lung cancer using a network pharmacology and molecular docking approach. **Methods:** Experimental research with a cloud computing design. This study includes extract preparation (sampling, making simplicia, and making extracts), analysis of phytochemical compounds with LC-HRMS. In silico analysis in the form of software includes Cytoscape 3.8.2, Autodock Vina 1.2.3, Mgltools 1.5.7, OpenBabel 2.4.1, Git-Bash, LigPlot, and PyMOL. **Results:** The results of network pharmacology identified myricetin, quercetin, and naringenin compounds as compounds that have the potential to cure lung cancer. The main protein targets in healing include GAPDH, AKT1, EGFR, SCR, and TP53. Molecular docking results show that staurosporine, methionine, and tyrosin compounds have the same biological activity as the reference compound (gefitinib) in curing lung cancer by inhibiting and inhibiting the GAPDH, AKT1, EGFR, SCR, and TP53 receptors. **Conclusion:** Based on the description above, it can be concluded that myricetin, quercetin, and naringenin compounds have the same biological activity as the reference compound (gefitinib) in curing lung cancer.

Keyword: *Mangifera caesia*, lung cancer, cancer cure, network pharmacology, molecular docking.