

IDENTIFIKASI DAN MOLECULAR DOCKING KOMPONEN UTAMA MINYAK KULIT BUAH JERUK NIPIS SEBAGAI AGEN ANTIKANKER

Indah Hairunisa^{1*}, Normaidah², Sylvan Septian Ressandy¹, Fhirda Azhari¹

¹Program Studi Farmasi, Fakultas Kesehatan dan Farmasi, Universitas Muhammadiyah Kalimantan Timur

²Program Studi S-1 Farmasi, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Lambung Mangkurat

*Email: ih787@umkt.ac.id

Artikel diterima: 3 Agustus 2019; Disetujui: 29 Oktober 2019

ABSTRAK

Kanker merupakan penyakit penyebab kematian tertinggi di dunia. Penyakit ini diketahui memiliki regulasi yang berbeda dari penyakit lainnya. Pengembangan obat dewasa ini adalah dengan menargetkan obat antikanker pada situs regulasi kanker yang ada pada *hallmark of cancer*. Jeruk nipis (*Citrus aurantifolia*) merupakan salah satu jenis Citrus (jeruk) yang mengandung unsur-unsur senyawa kimia yang memiliki aktivitas sebagai agen antikanker. Kulit jeruk nipis diketahui memiliki kandungan bioaktif berupa minyak atsiri dan flavonoid seperti hesperidin dan hesperitin. Kandungan senyawa ini erat hubungannya dengan aktivitas antikanker. Penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi kandungan senyawa pada minyak kulit buah jeruk nipis dan kajian *in silico molecular docking* senyawa tersebut pada protein yang berperan dalam regulasi sel kanker. Minyak kulit buah jeruk nipis didapatkan dengan menggunakan metode distilasi uap kemudian dianalisis dengan menggunakan GC-MS untuk mengetahui komponen penyusunnya untuk selanjutnya dianalisis *in silico* menggunakan *software* YASARA 10.1.8, MarvinSketch 15.4.20, PLANTS. Hasil menunjukkan komponen utama minyak kulit buah jeruk nipis adalah senyawa d-limonen dan beta-pinen dengan persentase 59,71% dan 36,81%. Analisis *in silico* menunjukkan masing-masing senyawa ini memiliki afinitas yang lebih besar dari pada ligan native pada protein caspase-8 yang ada pada regulasi apoptosis. Berdasarkan hasil ini dapat disimpulkan, bahwa minyak kulit buah jeruk nipis memiliki potensi untuk dikembangkan sebagai agen antikanker.

Kata kunci: Jeruk nipis, kanker, *in silico*, minyak

ABSTRACT

*Cancer is the highest cause of death in the world. This disease is known to have different regulations from other diseases. The development of drugs today is to target anticancer drugs on cancer regulation sites at Hallmark of Cancer. Lime (*Citrus aurantifolia*) is one type of Citrus (orange) which contains beneficial chemical compounds and active as anticancer agents. Lime peel is known to have bioactive content in the form of essential oils and flavonoids such as hesperidin and hesperitin. The content of this compound is closely related to anticancer activity.*

This study aims to identify the content of compounds in lime peel oil and the study of molecular docking silico in these compounds in protein that play a role in the regulation of cancer cells. Lime peel oil is obtained using the steam distillation method then analyzed using GC-MS to determine its constituent components to be analyzed in silico then using YASARA 10.1.8, MarvinSketch 15.4.20, and PLANTS software. The results showed that the main components of lime peel oil were d-limonen and beta-pinen with a percentage of 59.71% and 36.81%. In silico analysis shows that each of these compounds has an affinity greater than the native ligand on caspase-8 proteins (protein regulation of apoptosis). Based on these results it can be concluded, that the lime peel oil has the potential to be developed as an anticancer agent.

Keywords: *Lime, cancer, in silico, oil*