

**FAKULTAS KEDOKTERAN DAN ILMU KESEHATAN  
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH MAKASSAR**

Skripsi, 2026

**ANALISIS POTENSI SENYAWA DAUN KIRINYUH (*Chromolaena odorata* L.)  
TERHADAP ANTIKANKER PARU-PARU MELALUI PENDEKATAN  
*MOLECULAR DOCKING* DAN *MOLECULAR DYNAMICS***

**ABSTRAK**

**Latar Belakang:** Kanker paru-paru merupakan salah satu penyakit yang menyebabkan kematian tertinggi didunia, salah satu penyebabnya yaitu karena paparan dari zat berbahaya seperti asap rokok, debu, dan zat kimia yang masuk kedalam saluran pernapasan. Pengobatan yang dilakukan untuk mengatasi penyakit kanker paru-paru yaitu kemoterapi, namun pengobatan ini sering menimbulkan efek samping, maka dari itu dilakukan pengobatan alternatif lain dengan menggunakan bahan alam. Salah satu nya yaitu tanaman daun kirinyuh (*Chromolaena odorata* L.), diketahui tanaman tersebut mengandung berbagai senyawa flavonoid yang memiliki efek farmakologis, termasuk aktivitas antikanker.

**Tujuan Penelitian:** Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis potensi senyawa yang terkandung dalam daun kirinyuh (*Chromolaena odorata* L.) sebagai kandidat terapi kanker paru-paru secara *in silico*

**Metode Penelitian:** Penelitian dilakukan secara *in silico* berupa penelitian non eksperimental berbasis komputasi dengan pengujian *molecular docking*, *molecular dynamics*, dan prediksi ADMET terhadap senyawa uji dari daun kirinyuh (*Chromolaena odorata* L.) dalam menghambat aktivitas reseptor kanker paru-paru. Proses *molecular docking* dilakukan menggunakan PyRx dan dianalisis berdasarkan nilai RMSD, *binding affinity* serta interaksi residu asam amino. Selanjutnya hasil *docking* terbaik dianalisis menggunakan simulasi *molecular dynamics* dengan parameter RMSD, RMSF, dan MM-PBSA. Kemudian, dilakukan prediksi ADMET pada semua senyawa uji.

**Hasil Penelitian:** Berdasarkan hasil penelitian, dapat disimpulkan bahwa semua senyawa uji yang terdapat pada tanaman kirinyuh mampu berpotensi dalam menghambat aktivitas kanker paru-paru melalui interaksi dengan protein target yaitu EGFR, ALK, dan KRAS. Potensi tersebut ditunjukkan berdasarkan hasil dari pengujian *in silico* melalui pendekatan *molecular docking*, *molecular dynamics*, serta prediksi ADMET

**Kata Kunci:** Kanker paru-paru, *Chromolaena odorata* L, *Molecular docking*, *Molecular dynamics*, ADMET