

**UJI AKTIVITAS ANTIKANKER PAYUDARA
SENYAWA TURUNAN ESTER α -MANGOSTIN
SECARA *IN SILICO***

SKRIPSI

ANNISA NURUL FADILA

A211003



**SEKOLAH TINGGI FARMASI INDONESIA
YAYASAN HAZANAH
BANDUNG
2025**

**UJI AKTIVITAS ANTIKANKER PAYUDARA
SENYAWA TURUNAN ESTER α -MANGOSTIN
SECARA *IN SILICO***

SKRIPSI

Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi

ANNISA NURUL FADILA

A211003



**SEKOLAH TINGGI FARMASI INDONESIA
YAYASAN HAZANAH
BANDUNG
2025**

**UJI AKTIVITAS ANTIKANKER PAYUDARA
SENYAWA TURUNAN ESTER α -MANGOSTIN
SECARA *IN SILICO***

**ANNISA NURUL FADILA
A211003**

Juni 2025

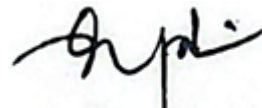
Disetujui oleh :

Pembimbing



Dr. apt Wiwin Winingsih, M.Si.

Pembimbing



Dr. apt. Dewi Astriany, M.Si.

KUTIPAN

Kutipan atau saduran baik sebagian ataupun seluruh naskah, harus menyebut nama pengarang dan sumber aslinya, yaitu Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia.

PERSEMBAHAN

Karya penutup perjalanan di jenjang Si ini dengan penuh rasa syukur dan cinta ku persembahkan kepada kedua orang tuaku tercinta, yang telah menjadi sumber kekuatan, inspirasi, dan berjuang keras demi masa depanku. Dalam setiap langkahku selalu ada dukungan dan nasihat penuh makna ditnagh gelapnya berjuang. Semoga segala upaya dan pengorbanan kalian menjadi amal jariyah yang terus mengalir, menjadi pahala abadi yang menyertai kalian dalam setiap helaan napas.

ABSTRAK

Kanker payudara merupakan jenis kanker yang paling banyak terjadi pada wanita di seluruh dunia dan masih menjadi tantangan besar dalam pengobatan karena resistensi obat dan efek samping dari kemoterapi. Senyawa alami seperti α -mangostin yang berasal dari kulit manggis memiliki potensi sebagai agen antikanker karena aktivitas biologisnya yang kuat serta struktur kimianya yang memungkinkan untuk dimodifikasi guna meningkatkan efektivitas. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi aktivitas antikanker dari tiga senyawa turunan ester α -mangostin terhadap tiga target protein kanker payudara melalui pendekatan *in silico* menggunakan metode *molecular docking*, pada Estrogen Receptor Alpha (3ERT), Multidrug Resistance ABC Transporter (1MV5), dan H-Ras p21 (1Q21). Simulasi *molecular docking* yang digunakan pada penelitian ini yaitu perangkat lunak PLANTS dan visualisasi dengan LigPlot+. Hasil validasi menunjukkan nilai RMSD $< 2 \text{ \AA}$, yang menandakan metode *docking* valid. Turunan ester α -mangostin menunjukkan peningkatan potensi aktivitas antikanker payudara secara *in silico* dibandingkan senyawa induknya, pada semua target. Hal ini didukung oleh nilai energi bebas ikatan yang lebih rendah dan pola interaksi yang lebih stabil. Dari hasil *docking*, mangostin turunan 1 menunjukkan skor afinitas tertinggi terhadap protein 3ERT, dan mangostin turunan 3 menunjukkan skor afinitas tertinggi terhadap protein 1MV5 dan 1Q21. Namun demikian, hasil skor afinitas uji menunjukkan nilai yang tidak melebihi *ref_ligand* yang dapat menyebabkan efektivitas antikanker dari senyawa turunan ester α -mangostin dalam studi ini belum memenuhi kriteria sebagai kandidat kuat terapi kanker payudara. Adanya interaksi, ikatan hidrogen, interaksi hidrofobik dan ikatan elektrostatik yang terbentuk antara ligan dan residu aktif target protein sangat berpengaruh terhadap nilai afinitas yang dihasilkan.

Kata kunci: Kanker payudara, α -mangostin, esterifikasi, *molecular docking*, *in silico*.

ABSTRACT

Breast cancer is the most prevalent type of cancer among women worldwide and remains a major challenge in treatment due to drug resistance and side effects from chemotherapy. Natural compounds such as α -mangostin derived from mangosteen peel have potential as anticancer agents due to their strong biological activity and chemical structure that allows for modification to enhance effectiveness. This study aims to evaluate the potential anticancer activity of three α -mangostin ester derivative compounds against three breast cancer target proteins through an in silico approach using molecular docking methods on Estrogen Receptor Alpha (3ERT), Multidrug Resistance ABC Transporter (1MV5), and H-Ras p21 (1Q21). The molecular docking simulation used in this study employed PLANTS software and visualization with LigPlot+. Validation results showed RMSD values $< 2 \text{ \AA}$, indicating that the docking method is valid. The α -mangostin ester derivatives demonstrated improved potential breast cancer anticancer activity in silico compared to their parent compound across all targets. This is supported by lower binding free energy values and more stable interaction patterns. From the docking results, mangostin derivative 1 showed the highest affinity score against the 3ERT protein, while mangostin derivative 3 showed the highest affinity score against the 1MV5 and 1Q21 proteins. However, the test affinity scores showed values that did not exceed the ref_ligand, which may indicate that the anticancer effectiveness of the α -mangostin ester derivative compounds in this study has not yet met the criteria as strong candidates for breast cancer therapy. The presence of interactions, hydrogen bonds, hydrophobic interactions, and electrostatic bonds formed between ligands and active residues of target proteins significantly influences the resulting affinity values.

Keywords: Breast cancer, α -mangostin, esterification, molecular docking, In silico.

KATA PENGANTAR

Bismillahirrahmanirrahim,

Puji dan syukur penulis panjatkan ke hadirat Allah SWT atas segala berkah rahmat dan ridho-Nya penulis dapat menyelesaikan penelitian dan penulisan skripsi yang berjudul **“Uji Aktivitas Antikanker Payudara Senyawa Turunan Ester α -Mangostin Secara *In Silico*”**.

Penelitian dan penulisan skripsi ini dilakukan untuk memenuhi salah satu syarat untuk mendapatkan gelar sarjana pada Program Studi Sarjana Farmasi Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia.

Penulis mengucapkan terima kasih kepada dosen pembimbing Dr. apt. Wiwin Winingsih, M.Si. dan Dr. apt. Dewi Astriany, M.Si. atas bimbingan, nasihat, dukungan, serta pengorbanan yang diberikan. Pada kesempatan ini, tidak lupa penulis mengucapkan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada:

1. Dr. apt. Adang Firmansyah, M.Si., selaku Ketua Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia,
2. Dr. apt. Diki Prayugo, M.Si., selaku Wakil Ketua I Bidang Akademik,
3. Dr. apt. Hesti Riasari, M.Si., selaku Ketua Program Studi Sarjana Farmasi,
4. Apt. Anggi Restiasari S.Si, MH.Kes, M.S.Farm., selaku Dosen Wali yang telah banyak memberikan bimbingan dan arahan kepada penulis,
5. Seluruh staf dosen, staf administrasi, serta karyawan Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia,
6. Serta sahabat-sahabat angkatan 2021 yang telah memberikan inspirasi dan kegembiraan selama penulis kuliah di Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia. Dalam penyusunan skripsi ini masih banyak kesalahan dan kekurangan karena pengetahuan yang masih sangat terbatas. Oleh karena itu, dengan kerendahan hati diharapkan masukan berupa kritik dan saran yang bersifat membangun untuk perbaikan di masa yang akan datang. Penulis berharap semoga tugas akhir ini akan memberikan manfaat bagi penulis sendiri dan juga bagi pihak lain yang berkepentingan.

Bandung, Juni 2025
Penulis

DAFTAR ISI

PENGESAHAN	ii
KUTIPAN	ii
PERSEMBAHAN	iii
ABSTRAK	iii
<i>ABSTRACT</i>	v
KATA PENGANTAR	vi
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR LAMPIRAN	xiii
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Identifikasi Masalah	3
1.3 Tujuan Penelitian	3
1.4 Kegunaan Penelitian	4
1.5 Waktu dan Tempat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1 Manggis (<i>Garcinia mangostana</i> L.)	5
2.1.1 Klasifikasi Manggis	5
2.1.2 Habitat dan Morfologi	5
2.1.3 Kandungan Kimia	6
2.2 α -Mangostin Sebagai Antikanker	6
2.3 Gugus Hidroksil pada α -Mangostin	7
2.4 Turunan Ester α -Mangostin	8
2.5 Kanker	8
2.5.1 Patofisiologi Kanker	8
2.6 Kanker Payudara	10
2.6.1 Etiologi Kanker Payudara	10
2.6.2 Patofisiologi Kanker Payudara	11
2.6.3 Terapi Kanker Payudara	12
2.7 Reseptor (Protein Kanker Target)	13
2.7.2 3ERT (<i>Protein Estrogen Receptor Alpha</i>)	13
2.7.2 1MV5 (<i>Multidrug Resistance ABC Transporter ATP-binding and permease protein</i>)	14
2.7.3 1Q21 (<i>C-H-RAS P21 Protein Catalytic Domain</i>)	14
2.8 <i>In Silico</i>	15
2.8.1 <i>Molecular Docking</i>	15

2.8.2 PDB RCSB	16
2.8.3 PLANTS	16
2.8.4 YASARA.....	16
2.8.5 <i>MarvinSketch</i>	16
2.8.6 LIGPLOT.....	16
2.9 Visualisasi Interaksi Molekul.....	17
2.9.1 Ikatan Hidrogen	17
2.9.2 Ikatan Hidrofob.....	17
BAB III TATA KERJA.....	18
3.1 Alat.....	18
3.2 Bahan.....	18
3.3 Metode Penelitian.....	18
3.3.1 Validasi Reseptor.....	18
3.3.2 Tahapan Docking Terhadap Senyawa Bioaktif dan Pembanding (Tamoxifen)	20
3.3.3 Visualisasi Hasil <i>Docking</i>	22
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	24
4. 1 Preparasi Reseptor (protein) dan Ligan Referensi (<i>ref-Ligand</i>)	24
4. 2 Validasi <i>docking</i>	25
4. 3 Penyiapan Ligan Uji.....	26
4. 4 <i>Molecular Docking</i> Mangostin dan Turunannya	25
BAB V KESIMPULAN.....	38
5. 1 Kesimpulan	38
5. 2 Alur Penelitian Selanjutnya.....	38
DAFTAR PUSTAKA.....	39
LAMPIRAN 1	43
LAMPIRAN 2	45
LAMPIRAN 3	46
LAMPIRAN 4	52

DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
3. 1 Kegunaan <i>Software</i> dalam Peneliatian	19
4. 1 Hasil Visualisasi antara Target 3ERT dengan Ligan Uji	31
4. 2 Hasil Visualisasi antara Target 1MV5 dengan Ligan Uji	36
4. 3 Hasil Visualisasi antara Target 1Q21 dengan Ligan Uji	39

DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
2. 1 Buah Manggis.....	5
2. 2 Struktur α -mangostin	7
2. 3 Struktur α -mangostin	7
2. 4 Siklus Sel.....	9
2. 5 Kanker Payudara DCIS	11
2. 6 Kanker Payudara LCIS.....	12
2. 7 Struktur Protein 3ERT.....	12
2. 8 Struktur Protein 1MV5.....	12
2. 9 Struktur Protein 1Q21	12
3. 1 Struktur α -Mangostin	20
3. 2 Struktur Turunan Ester α -Mangostin 1	21
3. 3 Struktur Turunan Ester α -Mangostin 2	21
3. 4 Struktur Turunan Ester α -Mangostin 3.....	21
3. 5 Struktur Pembanding Tamoxifen	21
3. 6 Struktur Pembanding Nilotinib	24
4. 1 Hasil gambar sebelum dan sesudah preparasi protein 3ERT	24
4. 2 Hasil gambar sebelum dan sesudah preparasi <i>ref_ligand</i> 3ERT	24
4. 3 Gambar senyawa uji yang telah di preparasi.....	25
4. 4 Hasil Visualisasi Penambatan Mangostin dengan Reseptor 3ERT..	32

DAFTAR LAMPIRAN

Gambar	Halaman
1 Persiapan Protein dan <i>Ref_ligand</i>	48
2 VALIDASI <i>DOCKING</i>	50
3 HASIL SKOR <i>DOCKING</i>	51
4 VISUALISASI <i>LIGPLOT</i>	57

DAFTAR PUSTAKA

- Almattin, B. N., Lia Aulifa, D., & Aly Al Shofwan., 2022. Kalkon dan Potensinya sebagai Antikanker : Literatur review. *Jurnal Farmasi Klinik Indonesia*, 11(4), pp. 360–375.
- Agrawal, R., Punarva, H. B., Heda, G. O., Vishesh, Y. M., & Karunakar, P., 2023. VinaLigGen: A Method to Generate LigPlots and Retrieval of Hydrogen and Hydrophobic Interactions from Protein-Ligand Complexes. *Journal of biomolecular structure & dynamics*, pp. 1-4 .
- Albeshr, M., 2023. Perangkat Lunak Docking Molekuler Protein-Ligand ANT System (PLANTS): Aplikasi dalam Penemuan Obat dan Penyaringan enyawa Bioaktif. *Jurnal Pemodelan Molekuler*, 29 (6), pp. 110-119.
- Arnesen. *et al.*, 2021. Estrogen Receptor Alpha utations in Breast Cancer Cells Cause ene Expression Changes Through Constant Activity and Secondary Effects. *Cancer Research*, 81(3), pp. 539–551.
- Badan Pengawas Obat dan Makanan Republik Indonesia., 2012. Monografi Tumbuhan Obat Indonesia, Volume 2. Jakarta: BPOM RI.
- Carter. *et al.*, 2023. The Energetic Origins of Pi-Pi Contacts in Proteins. *Journal of the American Chemical Society*, 145(45), pp. 24836–24851.
- Chen, Z. *et al.*, 2023. Role of Hydrophobic Interactions in Molecular Docking Accuracy. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 63(6), pp. 1678-1692.
- Departemen Kesehatan Republik Indonesia., 2017. Farmakope Herbal Indonesia (Edisi II). Jakarta: Departemen Kesehatan Republik Indonesia.
- Emons G, Mustea A, Tempfer C., 2020. Tamoxifen and Endometrial Cancer: a Janus-Headed Drug. *Cancers.*, pp. 12.
- Ferwadi, S. Gunawan, R. Astuti, W., 2017. Studi Docking Molekuler Senyawa Asam Sinamat dan Derivatnya sebagai Inhibitor Protein 1j4x pada Sel Kanker Serviks. *Jurnal Kimia Mulawarman* 14(2), pp. 84-90.
- Gu, X., Mao, Y., Liu, D., Long, D. and Zhou, Y., 2021. Unveiling The “Invisible” Druggable Conformations Of GDP-Bound Inactive Ras. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 118, pp.1–7.
- Hayu, L., Rahman, F. and Putri, D., 2015. Kanker Dan Karsinogenesis. Yogyakarta: Universitas Ahmad Dahlan Press. ISBN: 9786235635897.
- Hidayat, S., Ibrahim, F., Pratama, K. and Muchtaridi, M., 2021. The Interaction Of Alpha-Mangostin And Its Derivatives Against Main Protease Enzyme In COVID-19 Using In Silico Methods. *Journal of Advanced Pharmaceutical Technology & Research*, 12, pp.285–290.
- Hidayati, T. and Akrom, A., 2021. *Epidemiologi & Biomolekuler Kanker*. Jakarta: Azkiya Publishing. ISBN: 9786236744840.
- Hadiangoro, S., dkk., 2018. Efektifitas Penggunaan Co-Immobilized Lipase Pada Reaksi Esterifikasi Asam Lemak Hasil Hidrolisis Minyak Kelapa. *Jurnal X*, 2, pp.23–30.

- Huang, Y., Gao, Z., Li, S., Wu, L., Lin, H., Tan, C., Zhang, O. and Li, S., 2024. Re-Dock: Towards Flexible And Realistic Molecular Docking With Diffusion Bridge.
- Ischak, N.I., Aman, L.O., Hasan, H., Kilo, A.L. and Asnawi, A., 2023. In Silico Screening Of Andrographis Paniculata Secondary Metabolites As Anti-Diabetes Mellitus Through PDE9 Inhibition. *Research In Pharmaceutical Sciences*, 18(1), pp.100–111.
- Johnson, C.W. et al., 2017. The Small GTPases K-Ras, N-Ras, And H-Ras Have Distinct Biochemical Properties Determined By Allosteric Effects. *Journal Of Biological Chemistry*, 292.
- Kananenka, A. and Skinner, J., 2020. Unusually Strong Hydrogen Bond Cooperativity In Particular (H₂O)₂₀ Cluster. *Physical Chemistry Chemical Physics: PCCP*.
- Kim, S.M., Han, J.M., Le, T.T., Sohng, J.K. and Jung, H.J., 2020. Anticancer And Antiangiogenic Activities Of Novel α -Mangostin Glycosides In Human Hepatocellular Carcinoma Cells Via Downregulation Of C-Met And HIF-1 α . *International Journal Of Molecular Sciences*, 21(11), p.4043.
- Krishnan, Y., Vinod, S., Basker, L., Sreedevi, S., Ravichandran, K., Babu, L., Rajendran, K., Parthiban, P., Arumugam, G., Rajaraman, V., Vaidyanathan, R., Perumal, T. and Mahalingam, V., 2023. Molecular Docking Approach On The Binding Stability Of Derivatives Of Phenolic Acids (DPAs) With Human Serum Albumin (HSA): Hydrogen-Bonding Versus Hydrophobic Interactions Or Combined Influences?. *JCIS Open*.
- Kusuma, R., Pratama, D. and Wijaya, S., 2022. Komparasi Metode Multi Layer Perceptron (MLP) Dan Support Vector Machine (SVM) Untuk Klasifikasi Kanker Payudara. *MIND Journal*, 7(1), pp.51–60.
- Land, H. and Humble, M.S., 2018. Chapter 4 In *Biocatalytic Investigations*. 1685, pp.43–67.
- Laxmi, K.L., 2022. Characterization Of Ligand N'-[(1E)-1-Phenylethylidene]-1, 3-Benzothiazole-2-Carbohydrazide By Using Marvin Sketch 20.8 Software. *Oriental Journal Of Chemistry*, 38(1), pp.77–84.
- Lazzeroni, M. et al., 2023. Randomized Placebo Controlled Trial Of Low-Dose Tamoxifen To Prevent Recurrence In Breast Noninvasive Neoplasia: A 10-Year Follow-Up Of TAM-01 Study. *Journal Of Clinical Oncology*, 41, pp.3116–3121.
- Lee, J. et al., 2022. Improved Productivity Of Naringin Oleate With Flavonoid And Fatty Acid By Efficient Enzymatic Esterification. *Antioxidants*, 11(2).
- Ligplot.apk, n.d. LigPlot+ Version 2.2, Developed By European Bioinformatics Institute (EMBL-EBI).
- Landeros-Martínez, L., Glossman-Mitnik, D. and Flores-Holguín, N., 2018. Interaction Of Tamoxifen Analogs With The Pocket Site Of Some Hormone Receptors: A Molecular Docking And Density Functional Theory Study. *Frontiers In Chemistry*, 6.

- Lu, Y., Guan, T., Wang, S., Zhou, C., Wang, M., Wang, X., Zhang, K., Han, X., Lin, J., Tang, Q., Wang, C. and Zhou, W., 2023. Novel Xanthone Antibacterials: Semi-Synthesis, Biological Evaluation, And The Action Mechanisms. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 83, p.117232.
- Mangla, N. and Kohli, K., 2018. Kombinasi Agen Alami Dengan Obat Sintesis Untuk Terapi Kanker Payudara. *Jurnal Internasional Pengembangan Dan Penelitian*, 10.
- Mardianingrum, R., Yusuf, M., Hariono, M., Mohd Gazzali, A. and Muchtaridi, M., 2020. α -Mangostin And Its Derivatives Against Estrogen Receptor Alpha. *Journal Of Biomolecular Structure And Dynamics*, 40, pp.2621–2634.
- McMurry, J., 2017. *Kimia Organik (Edisi Ke-9)*. Cengage Learning. ISBN: 978-1305079981.
- Modi, S., Khatri, N. and Jain, P., 2022. Transporter Dan Perannya Dalam Aliran Keluar Obat Antikanker: Implikasi Untuk Terapi Kanker. *Jurnal Penelitian Kanker Dan Onkologi Klinis*, 148(1), pp.1–15.
- Muchtaridi, M. and Wijaya, C.A., 2017. Anticancer Potential Of α -Mangosteen. *Asian Journal Of Pharmaceutical And Clinical Research*, 10(12), pp.440–445.
- Naing, S. et al., 2023. *Garcinia Mangostana* L. Pericarp Extract And Its Active Compound α -Mangostin As Potential Inhibitors Of Immune Checkpoint Programmed Death Ligand-1. *Molecules*, 28, p.6991.
- NCBI, 2017. Breast Cancer Treatment. National Library Of Medicine. Available at: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK65969.11/> [Accessed 31 Dec. 2024].
- Nelson, D.L., 2017. *Prinsip Biokimia Lehninger (Edisi Ke-7)*. WH Freeman And Company. ISBN: 978-1464126109.
- Nila, F., Suryani, D. and Putri, R., 2017. *Buku Ajar Gizi Dan Kanker*. ISBN: 9786024321192.
- Nipun, T.S. et al., 2021. Active Site-Specific Quantum Tunneling Of hACE2 Receptor To Assess Its Complexing Poses With Selective Bioactive Compounds In Co-Suppressing SARS-CoV-2 Influx And Subsequent Cardiac Injury. *Journal Of Advanced Veterinary And Animal Research*, 8, pp.540–556.
- Nobili, S., Lapucci, A., Landini, I., Coronello, M., Roviello, G. and Mini, E., 2020. Role Of ATP-Binding Cassette Transporters In Cancer Initiation And Progression. *Seminars In Cancer Biology*, 60(July), pp.72–95.
- Palkar, P.M., 2024. Insights From Degradation Studies Of Alpha Mangostin From *Garcinia Mangostana*. *Natural Product Research*, pp.1–7.
- Phitaktim, S., Chomnawang, M., Sirichaiwetchakoon, K., Dunkhunthod, B., Hobbs, G. and Eumkeb, G., 2016. Synergism And The Mechanism Of Action Of The Combination Of α -Mangostin Isolated From *Garcinia Mangostana* L. And Oxacillin Against An Oxacillin-Resistant *Staphylococcus Saprophyticus*. *BMC Microbiology*, 16, pp.1–14.

- Siswoyo, R., 2013. Tumpas Penyakit Dengan Buah & Sayuran Warna Ungu. Sakti, Yogyakarta, pp.102–107, 110.
- Thahara, C.A., Rizarullah, R., Atika, R.A. and Wahab, A., 2022. Potensi Pendekatan In Silico Sebagai Penghambat Aktivitas Protein Protease Utama SARS-CoV-2 Dari Tiga Senyawa Tanaman Obat Jahe Merah. Jurnal IPA & Pembelajaran IPA, 6(3), pp.207–218.
- Ueda, K., Kimura, Y., Futamata, R., Kato, H., Nakatsu, T., Kodan, A. and Kioka, N., 2020. ABCB1/MDR1/P-gp Employs An ATP-Dependent Twist-And-Squeeze Mechanism To Export Hydrophobic Drugs. FEBS Letters, 595.
- Valde, E., Thompson, C. and Jensen, R., 1996. Molecular And Cellular Mechanisms Of Carcinogenesis. CRC Press.
- Xue, Q., Li, J., Fu, J., Zhang, A., Pan, W., Liu, X. and Russell, P., 2022. Evaluation Of The Binding Performance Of Flavonoids To Estrogen Receptor Alpha By Autodock, Autodock Vina And Surflex-Dock. Ecotoxicology And Environmental Safety, 233, p.113323.
- Yuan, Y., Xiang, Z., Xia, Y., Xie, J., Jiang, X. and Lu, Z., 2023. The Role Of ATP Binding Cassette (ABC) Transporters In Breast Cancer: Evaluating Prognosis, Predicting Immunity, And Guiding Treatment. Channels, 17(1).
- Zafrakas, M., Papasozomenou, P. and Emmanouilides, C., 2016. Sorafenib In Breast Cancer Treatment: A Systematic Review And Overview Of Clinical Trials. World J Clin Oncol, 7(4), pp.331–336.
- Zhou, Z., Wan, L., Yang, Q., Han, Y., Li, D., Lu, J. and Guo, C., 2016. Nilotinib Reverses ABCB1/P-Glycoprotein-Mediated Multidrug Resistance But Increases Cardiotoxicity Of Doxorubicin In A MDR Xenograft Model. Toxicology Letters, 259, pp.124–132.
- Zhuang, T. et al., 2015. p21-Activated Kinase Group II Small Compound Inhibitor GNE-2861 Perturbs Estrogen Receptor Alpha Signaling And Restores Tamoxifen-Sensitivity In Breast Cancer Cells. Oncotarget, 6, pp.43853–43868.
- Zhuang, Y., Quan, W., Wang, X., Cheng, Y. and Jiao, Y., 2024. Comprehensive Review Of EGCG Modification: Esterification Methods And Their Impacts On Biological Activities. Foods, 13(8), p.1232.