



**STUDI BIOKOMPUTASI SENYAWA FLAVONOID PADA  
BAJAKAH (*Spatholobus littoralis* HASSK) SEBAGAI  
ANTIANKER PARU**

Skripsi  
Diajukan guna memenuhi  
Sebagian syarat memperoleh derajat Sarjana Kedokteran  
Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan  
Universitas Lambung Mangkurat

Oleh  
Muhammad Naufal Allam  
2010911210010

**PROGRAM STUDI KEDOKTERAN PROGRAM SARJANA  
FAKULTAS KEDOKTERAN DAN ILMU KESEHATAN  
UNIVERSITAS LAMBUNG MANGKURAT  
BANJARMASIN**

**Desember 2023**

**PENGESAHAN SKRIPSI**

**ANALISIS ADMET DAN STUDI BIOKOMPUTASI AKTIVITAS  
ANTIOKSIDAN PEPTIDA DARI PROTEIN AHNAK nucleoprotein  
PADA IKAN PAPUYU**

**Ikhsan Nasrul Hikam, NIM : 2010911310003**

Telah dipertahankan di hadapan **Dewan Penguji Skripsi**  
Program Studi Kedokteran Program Sarjana  
Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan  
Universitas Lambung Mangkurat  
Pada Hari Senin, Tanggal 18 Desember 2023

**Pembimbing I**

Nama: Prof. Dr. Drs. Eko Suhartono. M.Si  
NIP : 196809071993031004

**Pembimbing II**

Nama: Dr. Dra. Fujiati. M.Si  
NIP : 196401041994032001

**Penguji I**

Nama: Dr. Isnaini. S.Si. M.Si. Apt  
NIP : 197301311999032001

**Penguji II**

Nama: dr. Mashuri. M.Kes., Sp.Rad(K)  
NIP : 197402092001121001

Banjarmasin, Januari 2024

Mengetahui,  
Koordinator Program Studi Kedokteran Program Sarjana



Prof. Dr. dr. Triawanti, M.Kes.  
NIP. 197109121997022001

## **PERNYATAAN**

Dengan ini saya menyatakan bahwa dalam skripsi ini tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu perguruan tinggi, dan sepanjang pengetahuan saya juga tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Banjarmasin, 8 Desember 2023



Muhammad Naufal Allam

## ABSTRAK

# STUDI BIOKOMPUTASI SENYAWA FLAVONOID PADA BAJAKAH (*Spatholobus littoraliss* HASSK) SEBAGAI ANTIKANKER PARU

Muhammad Naufal Allam

Kanker paru menjadi salahsatu penyakit paling mematikan di dunia. Berdasarkan data *Global Cancer Statistics* 2020, kanker paru merupakan penyakit keganasan paling mematikan di dunia dengan insiden terbanyak terjadi di Asia Tenggara. Pengobatan konservatif kanker berdasarkan data pembiayaan penanganan kanker di Indonesia cukup tinggi, sehingga pengobatan alternatif kanker menjadi salah satu solusi. Tanaman bajakah (*spatholobus littoraliss* HASSK) memiliki kandungan flavonoid yang tinggi. Kandungan flavonoid tersebut membuat tanaman bajakah memiliki potensi untuk menjadi antikanker. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis interaksi senyawa flavonoid yang terdapat pada bajakah terhadap protein yang berhubungan dengan kanker paru pada manusia. Penelitian ini menggunakan metode studi biokomputasi atau secara *in silico*, melalui *website* STITCH untuk mengetahui interaksi senyawa dan juga melalui *website* pkCSM untuk mengetahui sifat farmakokinetika senyawa yang terkandung dalam bajakah. Berdasarkan hasil penelitian, terdapat tiga senyawa flavonoid pada bajakah yang berinteraksi dengan protein yang berhubungan dengan kanker paru, yaitu quercetin, daidzein, dan formononetin. Ketiga senyawa tersebut berinteraksi dengan protein CYP1A1, CYP1B1, dan CYP2C8 seperti aktivasi, berikatan, ekspresi, dan penghambatan. Pada analisis ADMET didapatkan sifat farmakokinetika pada ketiga senyawa tersebut sehingga diketahui potensi senyawa tersebut sebagai antikanker.

**Kata-kata kunci:** ADMET, flavonoid, kanker paru, *spatholobus littoraliss*

## **ABSTRACT**

# **BIOCOMPUTATIONAL STUDY OF FLAVONOID COMPOUNDS IN BAJAKAH (*Spatholobus littoralis* HASSK) AS LUNG ANTICANCER**

**Muhammad Naufal Allam**

*Lung cancer is one of the deadliest diseases in the world. Based on Global Cancer Statistics 2020 data, lung cancer is the deadliest malignancy in the world with the highest incidence occurring in Southeast Asia. Based on conservative cancer treatment data, funding for cancer treatment in Indonesia is quite high, so alternative cancer treatment is one solution. Bajakah plants (*spatholobus littoralis* HASSK) have a high flavonoid content. The flavonoid content makes the bajakah plant have the potential to be anticancer. This research aims to analyze the interaction of flavonoid compounds found in bajakah on proteins associated with lung cancer in humans. This research uses biocomputational or in silico study methods, via the STITCH website to determine compound interactions and also via the pkCSM website to determine the pharmacokinetic properties of the compounds contained in bajakah. Based on research results, there are three flavonoid compounds in bajakah that interact with proteins associated with lung cancer, namely quercetin, daidzein, and formononetin. These three compounds interact with CYP1A1, CYP1B1, and CYP2C8 proteins such as activation, binding, expression, and inhibition. In the ADMET analysis, the pharmacokinetic properties of these three compounds were obtained so that the potential of these compounds as anticancer was known.*

**Keywords:** ADMET, flavonoids, lung cancer, *spatholobus littoralis*

## KATA PENGANTAR

Puji syukur ke hadirat Allah SWT, Tuhan Yang Maha Esa atas rahmat-Nya penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “**STUDI BIOKOMPUTASI SENYAWA FLAVONOID PADA BAJAKAH (*spatholobus littoraliss HASSK*) SEBAGAI ANTIKANKER PARU**” dengan tepat waktu.

Skripsi ini dibuat sebagai syarat untuk memperoleh derajat sarjana kedokteran di Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan Universitas Lambung Mangkurat. Pada kesempatan ini penulis mengucapkan banyak terima kasih kepada:

1. Dekan Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan Universitas Lambung Mangkurat, Dr. dr. Istiana, M. Kes. yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.
2. Koordinator Program Studi Kedokteran Program Sarjana, Prof. Dr. dr. Triawanti, M. Kes. yang telah memberi kesempatan dalam pelaksanaan penelitian.
3. Kedua dosen pembimbing, Prof. Dr. Drs. Eko Suhartono, M.Si dan Dr. Dra. Fujiati, M.Si yang dengan sabar membantu memberikan saran, masukan, arahan, serta semangat dalam penyelesaian skripsi ini.
4. Kedua dosen penguji, Dr. Isnaini, S.Si, M.Si, Apt dan dr. Mashuri, Sp.Rad(K)RI, M.Kes dan yang telah memberikan kritik serta saran sehingga skripsi ini menjadi lebih baik.

5. Kedua orang tua penulis terutama ibu tercinta Dyah Sulistyarini Dwi Astuti, S. Kep.NERS, Bapak tercinta Rudi Cahyono Putro, S.E, M.M, dan adik Septaryan Dwi Cahyono serta Nadia Wirdatul Izza yang memberikan restu, doa, dan semangat, serta keluarga yang penulis amat sayangi.
6. Rekan sejawat penelitian, Nibras Sayyidah Amini Lahdimawan, Ikhsan Nasrul Hikam, dan Iqmal Fadlilah Pratama yang menjadi teman dalam suka duka penelitian ini.
7. Rekan sejawat lainnya, Muhammad Ammar Qistan Ridhani, Rifki Muhammad Triatmojo, Naufal Fikri Akmal, Syifa Nurafifah Santrino, dan Shafira Aulia Islami beserta teman-teman Kucuk dan DC Awen, serta sejawat Program Studi Kedokteran Program Sarjana angkatan 2020.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih jauh dari kesempurnaan, akan tetapi penulis berharap penelitian ini bermanfaat bagi dunia ilmu pengetahuan.

Banjarmasin, Desember 2023

Penulis

## DAFTAR ISI

	<b>Halaman</b>
<b>HALAMAN JUDUL</b> .....	i
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b> .....	ii
<b>HALAMAN PERNYATAAN</b> .....	iii
<b>ABSTRAK</b> .....	iv
<b>ABSTRACT</b> .....	v
<b>KATA PENGANTAR</b> .....	vi
<b>DAFTAR ISI</b> .....	viii
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	x
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	xi
<b>DAFTAR SINGKATAN</b> .....	xii
<b>BAB I PENDAHULUAN</b> .....	1
A. Latar Belakang Masalah .....	1
B. Rumusan Masalah .....	3
C. Tujuan Penelitian .....	3
D. Manfaat Penelitian .....	4
E. Keaslian Penelitian .....	4
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA</b> .....	6
A. <i>Spatholobus littoraliss</i> HASSK .....	6



B. Flavonoid pada Bajakah.....	7
C. Antikanker .....	11
D. Kanker Paru .....	12
E. Hubungan Senyawa Flavonoid terhadap Kanker Paru .....	16
<b>BAB III LANDASAN TEORI.....</b>	<b>17</b>
<b>BAB IV METODE PENELITIAN .....</b>	<b>20</b>
A. Rancangan Penelitian.....	20
B. Sumber Data .....	20
C. Instrumen Penelitian .....	20
D. Variabel Penelitian.....	21
E. Definisi Operasional .....	21
F. Prosedur Penelitian .....	22
G. Analisis Data.....	
H. Waktu dan Tempat Penelitian.....	33
<b>BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN.....</b>	<b>34</b>
<b>BAB VI PENUTUP .....</b>	<b>47</b>
A. Simpulan.....	47
B. Saran.....	48
<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>	<b>49</b>

## DAFTAR TABEL

<b>Tabel</b>		<b>Halaman</b>
1.1	Keaslian Penelitian Studi Biokomputasi Senyawa Flavonoid pada Bajakah ( <i>Spatholobus littoralis</i> HASSK) sebagai Antikanker Paru .....	5
2.1	Mekanisme Antikanker Paru Dimodulasi oleh Flavonoid .....	9
2.2	Komponen Aktif Bajakah .....	11
5.1	Hasil Interaksi Senyawa Flavonoid yang Berinteraksi dengan Protein yang Berhubungan dengan Kanker Paru .....	36
5.2	Hasil Prediksi Absorpsi.....	39
5.3	Hasil Prediksi Distribusi .....	40
5.4	Hasil Prediksi Metabolisme .....	41
5.5	Hasil Prediksi Ekskresi .....	42
5.6	Hasil Prediksi Toksisitas .....	42

## DAFTAR GAMBAR

<b>Gambar</b>	<b>Halaman</b>
2.1 Kayu Bajakah.....	6
2.2 Struktur Kimia Utama Flavonoid.....	8
2.3 Algoritma Diagnosis Kanker Paru .....	15
3.1 Kerangka Teori Studi Biokomputasi Senyawa Flavonoid pada Bajakah ( <i>spatholobus littoralis HASSK</i> ) sebagai Antikanker Paru	18
3.2 Kerangka Konsep Studi Biokomputasi Senyawa Flavonoid pada Bajakah ( <i>spatholobus littoralis HASSK</i> ) sebagai Antikanker Paru	19
5.1 Hasil Interaksi Senyawa Flavonoid terhadap Protein pada Manusia.....	35

## DAFTAR SINGKATAN

ADMET	:	Absorpsi, Distribusi, Metabolisme, Ekskresi, dan Toksisitas
BBB	:	<i>Brain Blood Barrier</i>
CNS	:	<i>Central Nervous System</i>
CYP	:	<i>Cytochrom P450</i>
DNA	:	<i>deoxyribonucleic acid</i>
hERG	:	<i>the human Ether-à-go-go-Related Gene</i>
LD50	:	<i>Lethal Dose 50</i>
LOAEL	:	<i>Lowest-observed-adverse-effect Level</i>
MRTD	:	<i>Maximum Recommended Tolerated Dose</i>
mRNA	:	<i>mesenger Ribonukleat Acid</i>
NOAEL	:	<i>No-observed-adverse-effect Level</i>
OCT2	:	<i>Organic Cation Transporter 2</i>
SMILES	:	<i>Simplified molecular-input line-entry system</i>
VDss	:	<i>Steady State of Volume Distribution</i>
WHO	:	<i>World Health Organization</i>