



**INTERAKSI MOLEKULER SENYAWA FRAKSI AIR
DAUN BENALU BATU (*Paraboea sp.*) TERHADAP
BAX: A COMPUTATIONAL MODELING**

Tinjauan Terhadap Senyawa Nictoflorin, Caffeic acid, Betaine

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

Oleh
Najma Aliya
2210911220044

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

Agustus 2025

PENGESAHAN SKRIPSI

**INTERAKSI MOLEKULER SENYAWA FRAKSI AIR DAUN BENALU
BATU (*Paraboea sp.*) TERHADAP BAX: A COMPUTATIONAL
MODELING**

Tinjauan Terhadap Senyawa Nictoflorin, Caffeic acid, Betaine

Najma Aliya, NIM: 2210911220044

Telah dipertahankan di hadapan Dewan Penguji Skripsi
Program Studi Kedokteran Program Sarjana
Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan
Universitas Lambung Mangkurat
Pada Hari Jumat, Tanggal 22 Agustus 2025

Pembimbing I

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

Pembimbing II

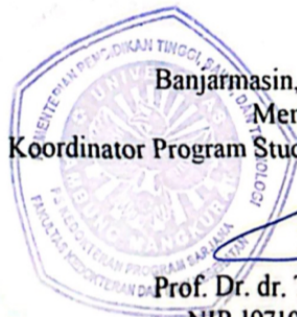
Nama: Dr. Apt. Joharman, S. Si, M. Si
NIP : 197903222005011002

Penguji I

Nama: Dr. dr. H. Huldani, MM., M. Imun
NIP : 197104151999031003

Penguji II

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



Banjarmasin, Desember 2025

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, 1 Agustus 2025



Najma Aliya

ABSTRAK

INTERAKSI MOLEKULER SENYAWA FRAKSI AIR DAUN BENALU BATU (*Paraboea sp.*) TERHADAP BAX: A *COMPUTATIONAL MODELING*

Najma Aliya

Kanker adalah kelompok penyakit yang ditandai oleh pertumbuhan sel abnormal yang tidak terkendali dan dapat menyebar ke bagian tubuh lain, menyerang serta merusak jaringan sehat di sekitarnya. Penelitian ini bertujuan untuk mengeksplorasi dan menganalisis interaksi molekuler antara senyawa bioaktif pada fraksi air daun benalu batu (*Paraboea sp.*), yaitu *Nictoflorin*, *Caffeic acid*, dan *Betaine*, terhadap protein BAX yang berperan dalam jalur apoptosis sel kanker menggunakan pendekatan pemodelan komputasi molecular docking. Protein BAX merupakan protein pro-apoptosis yang berperan penting dalam induksi kematian sel kanker, sedangkan daun benalu batu diketahui mengandung senyawa bioaktif yang potensial sebagai agen antikanker. Molecular docking dilakukan menggunakan software AutoDock Vina untuk memprediksi afinitas ikatan dan jenis interaksi molekuler yang terjadi antara senyawa dengan domain aktif protein BAX. Hasil penelitian menunjukkan bahwa *Nictoflorin* memiliki afinitas ikatan terkuat dengan nilai -8,5 kcal/mol, diikuti oleh *Caffeic acid* (-5,3 kcal/mol) dan *Betaine* (-3,0 kcal/mol). Interaksi tersebut melibatkan berbagai jenis ikatan seperti ikatan hidrogen, ikatan *van der Waals*, ikatan hidrofobik, dan ikatan karbon-hidrogen yang berperan dalam stabilisasi kompleks protein-ligan. Penelitian ini mengindikasikan bahwa senyawa *Nictoflorin* memiliki potensi sebagai kandidat agen antikanker yang menarget protein BAX.

Kata-kata kunci: Kanker, Benalu Batu (*Paraboea sp.*), *Molecular Docking*, Protein BAX, *Nictoflorin*, *Caffeic acid*, *Betaine*.

ABSTRAK

MOLECULAR INTERACTIONS OF COMPOUNDS FROM THE WATER FRACTION OF STONE MISTLETOE LEAVES (*Paraboea sp*) WITH BAX: A COMPUTATIONAL MODELING

Najma Aliya

*Cancer is a group of diseases characterized by uncontrolled abnormal cell growth that can spread to other parts of the body, attacking and damaging surrounding healthy tissues. This study aims to explore and analyze the molecular interactions between bioactive compounds in the aqueous fraction of batu mistletoe leaf (*Paraboea sp.*), namely Nictoflorin, Caffeic acid, and Betaine, and the BAX protein which plays a role in the apoptosis pathway of cancer cells using a computational molecular docking approach. The BAX protein is a pro-apoptotic protein that plays an important role in inducing cancer cell death, while batu mistletoe leaf is known to contain bioactive compounds with potential as anticancer agents. Molecular docking was performed using AutoDock Vina software to predict the binding affinity and types of molecular interactions occurring between the compounds and the active domain of the BAX protein. The results showed that Nictoflorin had the strongest binding affinity with a value of -8.5 kcal/mol, followed by Caffeic acid (-5.3 kcal/mol) and Betaine (-3.0 kcal/mol). These interactions involved various types of bonds such as hydrogen bonds, van der Waals interactions, hydrophobic interactions, and carbon-hydrogen bonds that contribute to the stabilization of the protein-ligand complex. This study indicates that Nictoflorin has potential as a candidate anticancer agent targeting the BAX protein.*

*Keywords: Cancer, Batu Mistletoe, *Paraboea sp.*, Molecular Docking, BAX Protein, Nictoflorin, Caffeic Acid, Betaine.*

KATA PENGANTAR

Puji syukur ke hadirat Allah SWT yang telah memberikan rahmat-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan Skripsi yang berjudul **“INTERAKSI MOLEKULER SENYAWA FRAKSI AIR DAUN BENALU BATU (*PARABOEA SP*) TERHADAP BAX: A COMPUTATIONAL MODELING”**, tepat pada waktunya.

Skripsi ini disusun untuk memenuhi sebagian syarat guna memperoleh derajat sarjana kedokteran di Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan Universitas Lambung Mangkurat Banjarmasin. Dalam kesempatan ini penulis mengucapkan terimakasih kepada:

1. Dekan Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan Prof. Dr. dr. Syamsul Arifin, M.Pd, FISPH, FISCAM yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.
2. Koordiantor Program Studi Kedokteran Program Prof. Dr. Dr. Triawanti, M.Kes yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.
3. Kedua dosen pembimbing Dr. Dra. Fujiati, M.Si. dan Dr. Apt. Joharman, S.Si M.Si. yang berkenan memberikan saran dan arahan dalam penyelesaian skripsi ini.
4. Kedua dosen penguji Dr. dr. H. Huldani, MM., M.Imun dan dr. Mashuri, Sp. Rad(k)RI, M.Kes yang memberi kritik dan saran sehingga skripsi ini menjadi semakin baik.

5. Kepala dan Staf di Laboratorium Farmakologi dan Laboratorium Biokimia-Biomolekuler Fakultas Kedokteran dan Ilmu Kesehatan Universitas Lambung Mangkurat Banjarbaru yang telah membantu dalam penelitian.
6. Orang tua tersayang ibunda Yuniar Darmayanti, S.Kep., M.H dan Ayahanda Kamarullah, S.Kep., M.A yang selalu memberikan dukungan moral, spiritual, serta doa tiada henti. Tanpa kasih sayang dan motivasi dari kalian, penulis tidak akan mampu sampai pada titik ini.
7. Adik-adik tersayang M.Rafiqi Alfarabi dan Zayn Arkan Alfarizki yang telah memberikan semangat dan dukungan.
8. Rekan peneliti Ahmad Saipudin, dan M. Alrizal Rahman serta semua pihak atas sumbangan pikiran dan bantuan yang telah diberikan.

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

Banjarmasin, 1 Agustus 2025



Najma Aliya

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL.....	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
HALAMAN PERNYATAAN.....	iii
ABSTRAK.....	iv
KATA PENGANTAR.....	vi
DAFTAR ISI.....	vii
DAFTAR TABEL.....	x
DAFTAR GAMBAR.....	xi
DAFTAR LAMPIRAN.....	xii
DAFTAR SINGKATAN.....	xii
BAB I PENDAHULUAN.....	1
A. Latar Belakang Masalah.....	1
B. Rumusan Masalah.....	3
C. Tujuan Penelitian.....	3
D. Manfaat Penelitian.....	4
E. Keaslian Penelitian.....	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	7
A. Daun Benalu Batu (<i>Paraboea sp.</i>).....	7
B. Kanker.....	12
C. Protein BAX.....	17
D. Docking Molekuler.....	22
BAB III LANDASAN TEORI DAN HIPOTESIS.....	27
A. Landasan Teori.....	27
B. Hipotesis.....	30
BAB IV METODE PENELITIAN.....	31
A. Rancangan Penelitian.....	31
B. Data Penelitian.....	31

C. Alat Penelitian.....	32
D. Variabel Penelitian.....	32
E. Definisi Operasional.....	32
F. Prosedur Penelitian.....	35
H. Teknik Pengumpulan dan Pengolahan Data.....	38
I. Cara Analisis Data.....	39
J. Waktu dan Tempat Penelitian.....	42
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN.....	43
BAB VI PENUTUP.....	50
A. Simpulan.....	50
B. Saran.....	51
DAFTAR PUSTAKA.....	52
LAMPIRAN.....	57

DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
1. 1 Keaslian Penelitian Interaksi molekuler senyawa fraksi air daun benalu batu (<i>Paraboea sp.</i>) terhadap BAX: A computational modeling.....	5
4. 1 Tabel Protein BAX.....	31
4. 2 Senyawa Fraksi air daun benalu batu.....	37
5. 1 Hasil molecular docking interaksi antara senyawa bioaktif fraksi air dan senyawa Nictoflorin, Caffeic acid, Betaine.....	43

DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
2. 1 Tanaman Benalu Batu (<i>Paraboea sp</i>).....	9
2. 2 Patomekanisme terjadinya kanker.....	15
2. 3 Struktur protein BAX.....	19
2. 4 Energi Aktivasi.....	24
3. 1 Kerangka Teori Potensi Antikanker Senyawa Fraksi Air Dalam Menghambat BAX.....	29
3. 2 Kerangka Konsep Penelitian Interaksi Molekuler Senyawa Fraksi Air Daun Benalu batu (<i>Paraboea sp.</i>) Terhadap BAX: <i>A</i> <i>Computational Modelling</i>	30
4. 1 Alur penelitian <i>docking molecular</i> antara ligan dengan BAX.....	41
5. 1 Visualisasi struktur 2 Dimensi BAX. Hasil Docking protein BAX dengan senyawa <i>Nictoflorin</i>	44
5. 2 Visualisasi struktur 2 Dimensi BAX. Hasil Docking protein BAX dengan senyawa <i>Caffeic acid</i>	45
5. 2 Visualisasi struktur 2 Dimensi BAX. Hasil Docking protein BAX dengan senyawa <i>Betaine</i>	45
5. 2 Visualisasi struktur 3 Dimensi BAX. Senyawa 1 (merah), senyawa 2 (kuning), senyawa 3 (hijau).....	46

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran	Halaman
1....Surat Pernyataan Ketua Peneliti PDWM.....	58
2....Surat Tugas Kegiatan Penelitian Profil Metabolit dan Aktivitas Fraksi Etil Asetat,n-Heksan dan Air Daun Benalu Batu (<i>Paraboea sp.</i>).....	60
3....Surat Keterangan Kelaikan Etik Penelitian Profil Metabolit, Aktivitas Antioksidan, Antiinflamasi , dan Antikanker Daun Benalu Batu (<i>Paraboea sp.</i>) <i>In Vitro dan In Silico</i>	62
4....Hasil Senyawa Bioaktif Fraksi Air Daun Benalu Batu (<i>paraboea sp.</i>).....	63
5....Skema <i>Moleculer Docking</i>	65
6....Hasil Docking.....	66

DAFTAR SINGKATAN

VEGF	: Vascular Endothelial Growth Factor
BCL-2	: B-cell lymphoma 2
BAX	: Bcl-2-associated X protein
HER-2	: Human Epidermal growth factor Receptor 2
STAT 3	: Signal Transducer and Activator of Transcription 3
LC-MS	: Liquid Chromatography-Mass Spectrometry
COX	: Cyclooxygenase
IC-50	: Inhibitory Concentration 50%
GC-MS	: Gas Chromatography-Mass Spectrometry
LC-50	: Median Lethal Concentration
DPPH	: 2,2-Diphenyl-1-picrylhydrazyl
UPLC-MS/MS	: Ultra Performance Liquid Chromatography-Tandem Mass Spectrometry
GLOBACAN	: Global Cancer Observatory
DNA	: Deoxyribonucleic Acid
NOXA	: Phorbol-12-myristate-13-acetate-induced protein 1 (pro-apoptotic protein)
PUMA	: p53 upregulated modulator of apoptosis (pro-apoptotic protein)
MOMP	: Mitochondrial Outer Membrane Permeabilization
BH	: Bcl-2 Homology (domain)
BIM-SAHB	: Bcl-2 Interacting Mediator-Stabilized Alpha Helix of Bcl-2

domains (peptida mimetik BH3)

PDB ID : Protein Data Bank Identifier (kode unik untuk struktur protein dalam database PDB)

HR-MS/MS : High-Resolution Tandem Mass Spectrometry