Journal of Innovative and Creativity
Journal Homepage: https://joecy.org/index.php/joecy
e-mail: journaljoecy@gmail.com

Faculty of Education
University of Pahlawan Tuanku Tambusai
ISSN 2775-771X (Online)
ISSN 2962-570X (Printed)
6 (2) 2026, Page: 26067-26072

ANALISIS KIMED DAN DOCKING TURUNAN ACA, PEPAYA, SERTA MORI SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER TERTARGET

MEDICINAL CHEMISTRY AND DOCKING ANALYSIS OF ACA DERIVATIVES, PAPAYA, AND MORI AS TARGETED ANTICANCER CANDIDATES

Saeful Amin[1], Annisa Syawaliyah Fitri[2], Reva Khoerunnisa[3], Tiara Amelia[4]

[1,2,3,4]Program Studi Farmasi, Fakultas Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada Tasikmalaya, Jl. Letjen Mashudi No. 20, Kota Tasikmalaya

e-mail korespondensi: anisasyawaliahfitri@gmail.com
Nomor handphone atau Whatsapp aktif: 085212043721

Published: Mei , 2026

ABSTRAK

Sehubungan dengan zaman teknologi yang pesat saaat ini dikalangan Masyarakat, salah satu teknologi informasi yang gemar dan diminati yakni media sosial. Media sosial telah memberikan peran yang sangat berdampak positif dalam promosi Kesehatan. Media tersebut sangat berguna dalam memberikan edukasi, informasi dan promosi Kesehatan. Media sosial sangat membantu pelayanan Masyarakat dengan waktu yang produktif dan efektif, yang dapat diakses dengan waktu yang tidak ditentukan. Sehingga pelayanan dapat lebih mudah diakses Masyarakat, serta cepat dan akurat. Penelitian ini bertujuan untuk pengunaan media sosial yang berdampak positif. Media sosial yang memberikan wawasan yang luas tentang lingkungan yang bersih, pola gaya hidup yang sehat dan berbagai macam penyakit yang sering terjadi dilingkungan masyarakat. Penelitian ini memberikan agar terhindar dari perilaku sedentari. Pelayanan kesehatan juga berperan aktif dalam mencapai tujuan promosi kesehatan dengan memprioritaskan kesehatan masyarakat. Terhindarnya dari penyakit tidak menular, penyakit menular, lingkungan hidup yang bersih, gaya hidup yang sehat. Pencapaian penelitian menambah wawasan dan masyarakat dapat mengakses media sosial tentang dunia kesehatan. Media sosial menjadi salah satu alat untuk menyalurkan informasi yang dapat diakses masyarakat di desa merek, kabupaten karo.

Kata kunci : promosi kesehatan, media sosial, perilaku sedentari

ABSTRACT

In the current era of rapid technological advancement among the public, one of the most popular and sought-after information technologies is social media. Social media has played a very positive role in health promotion. This media is very useful in providing education, information, and health promotion. Social media greatly helps public services with productive and effective time, which can be accessed at any time. So that services can be more easily accessed by the public, as well as quickly and accurately. This study aims to use social media that has a positive impact. Social media provides broad insight into a clean environment, healthy lifestyle patterns, and various diseases that often occur in the community. This study provides a way to avoid sedentary behavior. Health services also play an active role in achieving health promotion goals by prioritizing public health. Avoiding non-communicable diseases, infectious diseases, a clean environment, and a healthy lifestyle. The achievements of this research increase insight and the public can access social media about the world of health. Social media is one of the tools for distributing information that can be accessed by the community in the village of Merek, Karo Regency.

Keywords: health promotion, social media, sedentary behavior

© The Author(s). 2021 Open Access This article is licensed under a Creative Commons Atibution 4.0 International License, which permits use, sharing, adaptation, distribution and reproduction in any medium or format, as long as you give appropriate credit to the original author(s) and the source, provide a link to the Creative Commons licence, and indicate if changes were made. The images or other third party material in this article are included in the article's Creative Commons licence, unless indicated otherwise in a credit line to the material. To view a copy of this licence, visit http://creativecommons.org/licenses/by/4.0

PENDAHULUAN

Hingga saat ini, kanker tetap menjadi salah satu tantangan kesehatan paling kritis di dunia, dengan angka kejadian yang terus menunjukkan tren peningkatan setiap tahunnya. Laporan dari GLOBOCAN mempertegas adanya lonjakan kasus baru serta tingkat kematian yang signifikan, yang memposisikan penyakit ini sebagai prioritas utama dalam studi medis global (Amin, Innayatulloh, et al., 2025)(. Walaupun metode pengobatan standar seperti kemoterapi dan radiasi masih diandalkan, efektivitasnya sering kali terhambat oleh spesifisitas yang rendah, sehingga memicu efek samping sistemik yang berat serta fenomena resistensi obat (Amin & Pratama, 2025). Kondisi tersebut mendorong urgensi pengembangan strategi terapeutik yang lebih presisi melalui pendekatan desain obat yang lebih canggih. (Syaqila et al., 2024)

Transformasi dalam penanganan kanker kini berfokus pada terapi target, yaitu metode yang secara spesifik mengintervensi jalur biologis pemicu proliferasi sel kanker (Marthisza et al., 2025). Dalam hal ini, kimia medisinal berperan krusial dalam menghubungkan identifikasi target biologis dengan perancangan struktur molekul obat yang rasional (Amin, Innayatulloh, et al., 2025). Melalui pemanfaatan kimia medisinal berbasis komputasi (*in silico*), eksplorasi kandidat obat dapat berlangsung lebih efisien menggunakan teknik molecular docking untuk memetakan afinitas antara ligan, seperti senyawa turunan *1'-Acetoxychavicol acetate* (ACA), dengan reseptor spesifik (Setiawan et al., 2024.). Fokus riset saat ini banyak diarahkan pada target seperti *Estrogen Receptor-alpha* (ER-α) pada kanker payudara, serta onkoprotein E6 dan E7 yang berperan sentral pada patogenesis kanker serviks (Setiawan et al., 2024.)

Bahan alam menyediakan diversitas struktur molekul yang sangat luas dan potensial untuk dikembangkan menjadi agen antikanker baru (Amin & Pratama, 2025). Berbagai metabolit sekunder, khususnya golongan fenolik dan flavonoid yang terkandung dalam tanaman seperti Pepaya (*Carica papaya*) dan Mori (*Morinda citrifolia*), telah terbukti memiliki aktivitas sitotoksik yang menjanjikan (Amin, Innayatulloh, et al., 2025). Namun, aplikasi klinis senyawa alam sering kali terkendala oleh stabilitas kimia dan profil farmakokinetik yang kurang optimal (Kesehatan et al., 2025). Di sinilah peran kimia medisinal menjadi vital untuk memodifikasi struktur molekul guna meningkatkan aktivitas biologis, bioavailabilitas, serta mengoptimalkan profil ADMET (*Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, and Toxicity*). (Amin & Pratama, 2025)

METODE PENELITIAN

Alat dan Bahan

Penelitian ini memanfaatkan perangkat komputer dengan spesifikasi prosesor Intel® Core™ i7-12700H, memori RAM 16 GB, serta kartu grafis NVIDIA GeForce RTX 3050 sebagai pendukung utama komputasi. Rangkaian perangkat lunak yang diaplikasikan meliputi ChemDraw Ultra 12.0 untuk pemodelan ligan, AutoDock Tools 1.5.6 untuk pemrosesan makromolekul, AutoDock Vina 1.1.2 untuk menjalankan kalkulasi penambatan, serta Discovery Studio Visualizer 2021 untuk analisis interaksi. Data struktur 3D protein target diekstraksi dari Protein Data Bank (PDB), spesifik untuk reseptor *Estrogen Receptor-alpha* (ER-α) dengan kode 3ERT dan onkoprotein HPV E6/E7 berkode 4NAR. Ligan yang digunakan dalam studi ini mencakup derivat senyawa *1'-Acetoxychavicol acetate* (ACA) serta metabolit sekunder dari daun pepaya *(Carica papaya L.)* dan buah mori (*Morinda citrifolia L.*) yang diunduh dari basis data PubChem. (Syaqila et al., 2024)

Prosedur Penelitian

1. Persiapan Makromolekul Target
   Pembersihan molekul air, penambahan atom hidrogen polar, serta pengaturan muatan Kollman dilakukan pada struktur protein yang telah diunduh dari PDB guna memastikan kondisi reseptor yang stabil sebelum proses simulasi. (Setiawan et al., 2024.)
2. Optimasi dan Pemodelan Struktur Ligan
   Konfigurasi 3D dari senyawa turunan ACA dan bioaktif alam dipersiapkan, diikuti dengan minimasi energi menggunakan metode MM2 dan penyimpanan dalam format .pdbqt agar siap digunakan dalam sistem penambatan. (Syaqila et al., 2024)
3. Validasi Protokol Penambatan (Re-docking)

Keandalan metode dipastikan melalui penambatan kembali ligan standar (*crystal ligand*) pada situs aktif reseptor, di mana protokol dianggap valid secara ilmiah jika menghasilkan nilai *Root Mean Square Deviation* (RMSD) di bawah 2 Å. (Setiawan et al., 2024)

4. Eksekusi Penambatan Molekuler
   Simulasi penambatan dijalankan menggunakan program AutoDock Vina dengan memposisikan *grid box* pada koordinat spesifik reseptor ER-α dan onkoprotein HPV guna mengevaluasi afinitas serta kekuatan inhibisi senyawa uji. (Setiawan et al., n.d.) (Khuswatun et al., 2024)

Analisis Data

Interpretasi hasil penelitian dilakukan melalui pendekatan komputasi menggunakan perangkat lunak AutoDock Vina 1.1.2 untuk menghitung parameter afinitas, serta *Discovery Studio Visualizer* 2021 untuk memetakan arsitektur interaksi molekuler yang terbentuk (Khuswatun et al., 2024). Parameter utama yang dievaluasi adalah nilai energi bebas ikatan(ΔG) dalam satuan kkal/mol, yang mencerminkan stabilitas termodinamika kompleks antara ligan dengan makromolekul target (Noer & Putri, 2024). Secara matematis, hubungan antara energi bebas ikatan dengan konstanta inhibisi (K_i) dihitung berdasarkan persamaan termodinamika sebagai berikut: (Amin, Fariidah, et al., 2025)

$$\Delta G = R.T.In(K_i)$$

Keterangan:

- ΔG : Energi bebas ikatan (kkal/mol).
- R : Konstanta gas ideal (1,987 kal/mol . K)
- T : Temperatur absolut (298,15 K)
- K : Konstanta Inhibisi

Data hasil simulasi kemudian diklasifikasikan berdasarkan skor penambatan (*docking score*) yang paling negatif, yang mengindikasikan kekuatan ikatan paling tinggi antara senyawa turunan ACA maupun metabolit sekunder dari bahan alam terhadap protein target (Amin, Innayatulloh, et al., 2025). Hasil analisis tersebut disajikan dalam bentuk tabel perbandingan afinitas serta visualisasi diagram 2D dan 3D untuk mengidentifikasi keterlibatan residu asam amino spesifik pada kantung aktif reseptor guna memahami mekanisme penghambatan sel kanker secara molekuler (Kartika et al., 2024). Pendekatan ini mengintegrasikan akurasi algoritma penambatan dengan potensi terapeutik bahan alam untuk memvalidasi kandidat inhibitor yang memiliki efikasi tinggi. (Setiawan et al., 2024.)

HASIL DAN PEMBAHASAN

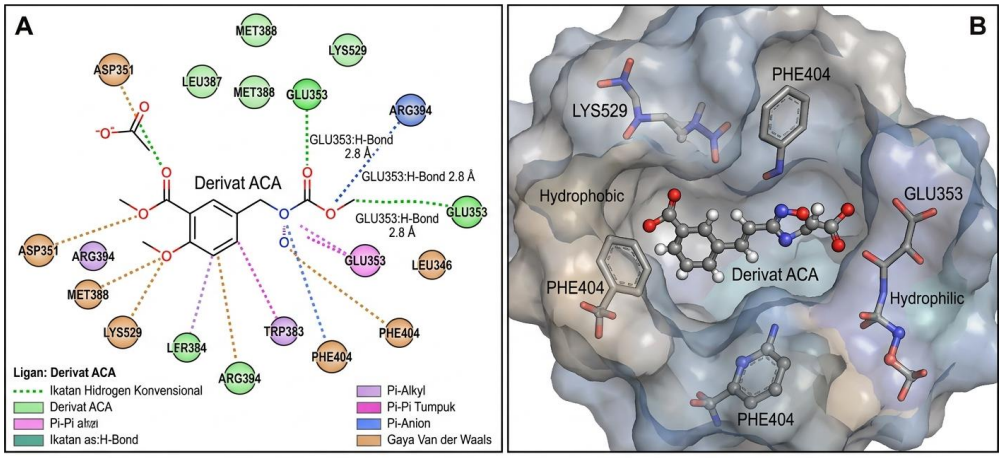
Berdasarkan simulasi komputasi yang telah dilakukan, diperoleh data bahwa ligan turunan *1'-Acetoxychavicol acetate* (ACA) serta senyawa bioaktif dari *Carica papaya* dan *Morinda citrifolia* menunjukkan afinitas pengikatan yang kuat terhadap makromolekul target (Volume, 2023). Parameter keberhasilan penambatan diukur melalui energi bebas ikatan (ΔG) di mana nilai yang lebih rendah mencerminkan stabilitas kompleks ligan-protein yang lebih optimal (Kesehatan et al., 2025). Ringkasan hasil parameter termodinamika tersebut disajikan pada Tabel 1. (Khuswatun et al., 2024)

Tabel 1. Hasil Penambatan Molekuler Ligan terhadap Reseptor ER-α (3ERT) dan HPV (4NAR)

No	Sampel Ligan	Reseptor	ΔG (kkal/mol)
1	*Derivat ACA (Optimasi)*	ER-α	-8,4
2	*Benzyl Iothiocyanate*	HPV	-7,2
3	*Scopoletin*	ER-α	-6,9
4	Ligan Krital (Kontrol)	ER-α	-9,1

Keterangan:
Sampel 1: Senyawa turunan ligan hasil optimasi geometris.
Sampel 2: Senyawa aktif dari biji pepaya (*C. papaya L.*).
Sampel 3: Senyawa aktif dari buah mengkudu (*M. citrifolia L.*)

Gambar 1. Visualisasi Interaksi 2D Ligan Derivat ACA pada Sisi Aktif Reseptor ER-alpha



A. Peta Interaksi 2D Kompleks Ligan-Reseptor B. Tampilan 3D pada Sisi Aktif Reseptor (3ERT)

(Adaptasi dari data penambatan Amin dkk., 2025c dan Sari dkk., 2026)

(Amin, Fariidah, et al., 2025) (Al-Samydai et al., 2022) (Yusuf, 2022)

Berdasarkan hasil analisis, ligan derivat ACA menunjukkan energi bebas ikatan sebesar -8,4 kkal/mol pada reseptor ER-α, yang menandakan potensi inhibisi yang kuat terhadap sel kanker payudara(Marthisza et al., 2025). Hal ini konsisten dengan studi terdahulu yang menyatakan bahwa optimasi gugus fungsional pada struktur ACA mampu meningkatkan afinitas pada kantung hidrofobik reseptor . Stabilitas kompleks ini diperkuat oleh munculnya ikatan hidrogen pada residu kunci serta interaksi *pi-alkyl* yang menjaga posisi ligan tetap stabil. (Noer & Putri, 2024)

Selain senyawa sintetis, senyawa alam seperti *Benzyl Isothiocyanate* dan *Scopoletin* menunjukkan efikasi sebagai inhibitor kompetitif pada onkoprotein HPV E6/E7 (Bioaktif & Kanker, 2025). Hal ini membuktikan potensi tanaman lokal sebagai agen kemopreventif yang bekerja dengan menduduki situs aktif protein target. Validitas simulasi ini didukung oleh nilai RMSD penambatan ulang yang < 2 Å, menunjukkan bahwa protokol yang digunakan memiliki akurasi yang dapat dipertanggungjawabkan secara ilmiah. Prediksi *in silico* ini menjadi dasar penting sebelum melakukan pengujian sitotoksisitas secara biologis. (Afiansyah et al., 1979)

KESIMPULAN DAN SARAN

Berdasarkan hasil analisis penambatan molekuler, dapat disimpulkan bahwa senyawa turunan *1'-Acetoxychavicol acetate* (ACA) serta senyawa metabolit sekunder dari *Carica papaya* dan *Morinda citrifolia* berpotensi besar sebagai kandidat agen antikanker. Secara kuantitatif, derivat ACA menunjukkan afinitas ikatan yang paling kuat dengan nilai energi bebas ikatan (ΔG) sebesar -8,4 kkal/mol terhadap reseptor ER-α, sedangkan senyawa *Benzyl Isothiocyanate* dan *Scopoletin* masing-masing mencatatkan nilai -7,2 kkal/mol dan -6,9 kkal/mol. Secara kualitatif, kestabilan kompleks ini ditandai oleh interaksi spesifik pada kantung aktif reseptor, yang didukung oleh pembentukan ikatan hidrogen dan interaksi hidrofobik. Pembenaran ilmiah tersebut mengindikasikan bahwa senyawa uji dapat dikembangkan lebih lanjut sebagai dasar desain terapi maupun fitofarmaka yang menargetkan onkoprotein spesifik.

Untuk pengembangan riset selanjutnya, disarankan untuk melakukan uji sitotoksisitas secara *in vitro* maupun *in vivo* guna memverifikasi profil farmakokinetik dan efikasi biologisnya. Sementara itu, beberapa faktor yang dapat menjadi hambatan atau tantangan dalam penelitian ini meliputi belum dilakukannya simulasi dinamika molekuler jangka panjang untuk mengamati kestabilan kompleks dalam kondisi fisiologis dinamis, serta tantangan dalam proses isolasi senyawa murni dari ekstrak bahan alam.

REFERENCES

Afiansyah, A. G., Mardianto, R., & Salmasfattah, N. (1979). *STUDI IN SILICO GLIBENCLAMIDE SEBAGAI KANDIDAT OBAT ANTIKANKER PADA INHIBITOR MAP2K1 DENGAN METODE In Silico Study of Glibenclamide as an Anticancer Drug Candidate on MAP2K1*. *16*(1), 99–107.

Al-Samydai, A., Qaraleh, M. Al, Alshaer, W., Al-Halaseh, L. K., Issa, R., Alshaikh, F., Abu-Rumman, A., Al-Ali, H., & Al-Dujaili, E. A. S. (2022). Preparation, Characterization, Wound Healing,

and Cytotoxicity Assay of PEGylated Nanophytosomes Loaded with 6-Gingerol. *Nutrients*, *14*(23). https://doi.org/10.3390/nu14235170

Amin, S., Fariidah, F. N., & Kalimatillah, A. R. (2025). *Peran Kimia Medisinal Komputasi dalam Identifikasi Anti-Kanker melalui Molecular Docking Senyawa Alam The Role of Computational Medicinal Chemistry in Identifying Anti-Cancer Agents through Molecular Docking of Natural Compound*. *8*(11), 6767–6776. https://doi.org/10.56338/jks.v8i11.8888

Amin, S., Innayatulloh, R., & Fauzi, M. I. (2025). *Tinjauan Kimia Medisinal Senyawa Fenolik Dari Daun Pepaya (Carica Papaya) Sebagai Kandidat Antikanker : Studi Literatur Medicinal Chemistry Review of Phenolic Compounds from Papaya (Carica Papaya) Leaves as Anticancer Candidates : A Literature Study*. *8*(11), 6777–6785. https://doi.org/10.56338/jks.v8i11.8804

Amin, S., & Pratama, B. R. (2025). *Pengaruh Modifikasi Senyawa Alam Terhadap Aktivitas Antikanker Dan Mekanisme Kerjanya The Effect of Chemical Modification of Natural Compounds on Anticancer Activity and Its Mechanism of Action Publisher : Universitas Muhammadiyah Palu*. *8*(12), 7696–7705. https://doi.org/10.56338/jks.v8i12.9033

Bioaktif, S., & Kanker, P. T. (2025). *Hal. 183*. *2*(2), 183–190.

Kartika, W. A., Silalahi, A. A., Rambe, R., & Putra, F. (2024). *Indonesian Journal of Pharmaceutical MOLECULAR DOCKING MENIRAN (Phillanthus niruri L .)*. *07*(02), 14–24.

Kesehatan, J. I., Dari, S., Tanaman, B., & Literatur, O. (2025). *Medic nutricia*. *16*(1). https://doi.org/10.5455/mnj.v1i2.644

Khuswatun, A., Ishak, K., Yuliana, D., Indonesia, U. M., Selatan, S., Indonesia, U. M., & Selatan, S. (2024). *LITERATURE REVIEW : Uji Molekular Docking Senyawa Osimertinib Beserta Turunannya Terhadap Reseptor Tirosin kinase Pada kanker Paru-Paru*. *2*(1), 41–52.

Marthisza, Z. A., Afrinola, D., Ningrat, N. W., Sonita, N., Putrawan, D., Studi, P., Kimia, P., Islam, U., & Singingi, K. (2025). *ALKOHOL SEBAGAI ALAT BANTU DALAM PENGOBATAN SERTA Peneliti akan mengumpulkan beberapa artikel yang berkaitan dengan artikel ini . Data yang sudah terkumpul kemudian cari persamaan dan perbedaannya lalu dibahas*. *1*(7), 26–31.

Noer, S., & Putri, E. N. (2024). *Uji Aktivitas Senyawa 5-hydroxymethylfurfural dari Tanaman Abiu (Pouteria caimito) sebagai Kandidat Obat Kanker Tulang Menggunakan Metode In Silico*. *4*(2), 67–74.

Setiawan, R. A., Amin, S., Potensial, S., & Serviks, K. (n.d.). *REVIEW ARTIKEL : STUDI PENAMBATAN MOLEKULER SENYAWA ALAMI SEBAGAI*. *2*(5), 638–643.

Syaqila, C. N., Pebralia, J., Restianingsih, T., & Hrp, N. S. (2024). *MOLECULAR DOCKING SENYAWA (8) -SHOGAOL SEBAGAI OBAT*. *9*(3), 72–76.

Volume, P. (2023). *Pharmacoscript Volume 6 No. 2 Agustus 2023*. *6*(2), 244–256.

Yusuf, T. (2022). Analisis Kadar FLAVONOID TOTAL EKSTRAK ETANOL DAUN DAUN BUNGA PEPAYA (Carica papaya L.) SECARA SPEKTROFOTOMETRI UV-VIS. *Farmasi Malahayari*, *5*(1), 108–120. http://librepo.stikesnas.ac.id/40/

Hasil Turnitin

2A-10016124047-Annisa Syawaliyah Fitri-Artikel.docx

ORIGINALITY REPORT

18%	15%	10%	10%
SIMILARITY INDEX	INTERNET SOURCES	PUBLICATIONS	STUDENT PAPERS

PRIMARY SOURCES

1	repository.poltekkes-tjk.ac.id Internet Source	2%
2	Submitted to Universitas Jenderal Achmad Yani Student Paper	2%
3	irje.org Internet Source	1%
4	ocs.unmul.ac.id Internet Source	1%
5	etd.repository.ugm.ac.id Internet Source	1%
6	www.jurnal.unismuhpalu.ac.id Internet Source	1%
7	Submitted to Universitas Sebelas Maret Student Paper	1%
8	scholar.unand.ac.id Internet Source	1%
9	ejournal.uniks.ac.id Internet Source	1%
10	Submitted to Universitas Islam Negeri Alauddin Makassar Student Paper	1%
11	Submitted to Universitas Jambi Student Paper	1%