

**SKRIPSI**

**EKSPLORASI SENYAWA POTENSIAL ANTI KANKER PARU**

**DARI EKSTRAK DAUN KEMANG (*Mangifera Caesia J.*)**

**DENGAN METODE IN SILICO**



**OLEH :**

**DYLLA LUTFIA AZZAHRA**

**214820103007**

**PROGRAM STUDI S1-FARMASI**

**FAKULTAS KESEHATAN DAN TEKNOLOGI**

**UNIVERSITAS AISYIYAH PALEMBANG**

**2025**

**SKRIPSI**

**EKSPLORASI SENYAWA POTENSIAL ANTI KANKER PARU**

**DARI EKSTRAK DAUN KEMANG (*Mangifera Caesia J.*)**

**DENGAN METODE IN SILICO**

**Skripsi Ini Diajukan Sebagai**

**Salah Satu Syarat Untuk Memperoleh Gelar**

**Sarjana Farmasi (S.Farm)**



**OLEH :**

**DYLLA LUTFIA AZZAHRA**

**214820103007**

**PROGRAM STUDI S1-FARMASI**

**FAKULTAS KESEHATAN DAN TEKNOLOGI**

**UNIVERSITAS AISYIYAH PALEMBANG**

**2025**

**LEMBAR PERSETUJUAN**  
**SKRIPSI**  
**EKSPLORASI SENYAWA POTENSIAL ANTI KANKER PARU**  
**DENGAN EKSTRAK DAUN KEMANG (*Mangifera Caesia J.*)**  
**DENGAN METODE *IN SILICO***

DISUSUN OLEH :  
Dylla Lutfia Azzahra  
214820103007

**Dosen Pembimbing:**

I. Dr. apt. Shaum Shiyan.,M.Sc  
NIK. 198605282012121005

(.....)

II. Intan Trisakti.,M.Farm  
NIK. 2023.11.096

(.....)

**Mengetahui,**

**Ketua Program Studi S1 Farmasi**



apt. Onny Indriani M.Farm  
NIK. 2014.10.025

**LEMBAR PENGESAHAN**  
**SKRIPSI**  
**EKSPLORASI SENYAWA POTENSIAL ANTI KANKER PARU**  
**DARI EKSTRAK DAUNKEMANG (*Mangifera caesia* J.)**  
**DENGAN METODE *IN SILICO***

DISUSUN OLEH :

Dylla Lutfia Azzahra  
214820103007

Telah dipertahankan di depan Tim Penguji pada Tanggal 13 Agustus 2025

**Dosen Penguji:**

- |   |         |
|---|---------|
| I. <u>Dr. apt. Shaum Shiyani, M.Sc</u><br>NIK. 198605282012121005 | (.....) |
| II. <u>Intan Trisakti M. Farm</u><br>NIK. 2023.11.096             | (.....) |
| III. <u>apt. Galih Pratiwi, M.Pharm., Sci</u><br>NIK. 2015.09.059 | (.....) |
| IV. <u>apt. Onny Indriani M.Farm</u><br>NIK. 2014.10.025          | (.....) |

**Disahkan Oleh,**  
**Dekan Fakultas Kesehatan Dan Teknologi**



Ns. Miming Oxyandi, S.Kep, M.Kes, M.Kep, Ph.D  
NIK. 2010.03.022

## MOTTO DAN PERSEMBAHAN

### MOTTO:

“Ketahuilah bahwa kemenangan bersama kesabaran, kelapangan bersama kesempatan, dan kesulitan bersama kemudahan.” (HR. Tirmidzi)

### Persembahan:

- ❖ Allah Subhanahu wa Ta’ala, berkat ridho, rahmat, dan kehendak-Nya penulis dapat menyelesaikan skripsi ini dan mendapatkan ilmu yang berharga, serta Baginda Nabi Muhammad Shalallaahu ‘Alayhi Wassalam yang memberi suri tauladan untuk umatnya.
- ❖ Bapak Khoirin, SKM., M.Kes. selaku Rektor Universitas Aisyiyah Palembang yang telah memberikan sarana dan prasarana sehingga studi penulis berjalan dengan lancar.
- ❖ Ns. Miming Oyandi, S.Kep, M.Kes, M.Kep, Ph.D selaku Dekan Fakultas Kesehatan dan Teknologi yang telah memberikan fasilitas, dukungan, serta kebijakan yang sangat membantu selama penulis menjalani studi hingga proses penyusunan skripsi ini.
- ❖ Ibu apt. Onny Indriani M.Farm selaku Ketua Prodi S1 Farmasi dan penguji II yang telah meluangkan waktu dan memberikan saran.
- ❖ Bapak Dr.apt. Shaum Shiyani.,M.Sc selaku Dosen Pembimbing I yang berkenan mengarahkan, meluangkan waktu, pikiran serta tenaga untuk memberikan bimbingan selama menyelesaikan skripsi ini
- ❖ Ibu Intan Trisakti M.Farm selaku Dosen Pembimbing II yang telah bersedia meluangkan waktu untuk memberikan motivasi,dukungan nasihat serta berbagai saran sehingga skripsi ini berjalan dengan lancar.
- ❖ Ibu apt. Galih Pratiwi, M.Pharm.,Sci. selaku penguji I yang telah meluangkan waktu dan memberikan saran.
- ❖ Seluruh dosen prodi S1 Farmasi dan Seluruh civitas akademika Universitas Aisyiyah Palembang yang telah memberikan pengetahuan, wawasan, dan bantuan dalam studi baik di dalam maupun di luar kampus selama proses perkuliahan.
- ❖ Diriku sendiri, yang selalu kuat dan mampu bertahan sampai saat ini dan sampai kapan pun. Terima kasih untuk diriku sendiri selalu semangat untuk

menyelesaikan skripsi ini dan tidak pernah menyerah.

- ❖ Skripsi ini penulis persembahkan untuk bapak Yanto dan ibu Fardiana tersayang yang tanpa lelah sudah mendukung semua keputusan dan pilihan dalam hidup penulis serta tidak pernah putus mendoakan penulis. Persembahkan kecil penulis untuk kedua orangtua. Ketika dunia menutup pintunya, bapak dan ibu membuka lengannya untuk penulis. Ketika orang-orang menutup telinga mereka, mereka berdua membuka hati untuk penulis. Terima kasih karena selalu ada untuk penulis.
- ❖ Adikku tersayang, Dviona dan Byarda yang tak pernah berhenti memberikan support, doa, nasihat, motivasi, serta keceriaan yang luar biasa sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini dengan senang hati.
- ❖ Nenekku Nasuba tercinta penulis mengucapkan terima kasih atas doa, dukungan, motivasi dan semangat. Sehingga penulis bisa menyelesaikan skripsi dengan lancar dan alm. Akas yang telah memberi motivasi, semangat, dan doa. Sehingga penulis dapat terus bersemangat dalam menyelesaikan skripsi ini.
- ❖ Nyai dan alm. Yai penulis mengucapkan terimakasih atas doa dan dukungan. Sehingga penulis bisa menyelesaikan skripsi dengan lancar.
- ❖ Teman-teman farmasi angkatan 2021, terimakasih atas kebersamaan selama ini. Terimakasih untuk memori yang kita rajut setiap harinya, atas canda tawa yang setiap hari kita miliki, dan atas solidaritas yang luar biasa.
- ❖ Sahabat seperjuangan, Alfina Damayanti dan Izzaty Parda Muniroh yang telah memberikan semangat, dukungan, motivasi sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan baik dan lancar. Dan harapan penulis persahabatan ini selamanya serta ucapan terimakasih selama di bangku perkuliahan atas dukungannya.
- ❖ Sahabatku Patma Junita yang telah memberi semangat dan dukungan selama di bangku perkuliahan.
- ❖ Kakaku sekaligus pembimbing (kak ais dan yu chan) yang memberikan waktu dan selalu membantu kesulitan serta dukungan kepada penulis.
- ❖ Kakak-kakakku (kak among, kak cia, kak yessi, kak win, kak ais, kak zhap) yang selalu memberikan semangat dan dukungan. Semoga selalu diberikan

kesehatan dan kemudahan atas segala yang dilakukan.

- ❖ Kak Athira, Melin, dan Sassy yang telah membantu penulis dalam menyelesaikan skripsi. Semoga selalu diberikan kemudahan atas segala yang dilakukan.
- ❖ Peliharaan kesayangan ku (ken dan cici) yang telah menemani penulis menyelesaikan skripsi. Semoga selalu diberikan kesehatan.
- ❖ Calon pendamping hidup penulis, terimakasih telah menjadi bagian dari perjalanan penulis hingga sekarang ini. Sampai bertemu di titik terindah menurut takdir ya.
- ❖ Semua pihak yang telah memberikan dukungan dan bantuan baik langsung maupun tidak langsung yang namanya tidak dapat disebutkan satu persatu.

Rasa hormat dan terimakasih bagi semua pihak atas segala dukungan dan doanya. Jazakumullah khairan katsiran. Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih memiliki banyak kekurangan, untuk itu penulis mengharapkan kritik dan saran yang sifatnya membangun. Akhirnya penulis mengucapkan terimakasih atas segala dukungan dan bantuan sehingga skripsi ini dapat terselesaikan. Semoga limpahan Rahman dan Rahim Allah tercurah kepada kita semua

## DAFTAR RIWAYAT HIDUP



### IDENTITAS DIRI

NAMA : Dylla Lutfia Azzahra  
NIM : 214820103007  
TEMPAT/TANGGAL LAHIR : Lampung Tengah/14 Januari 2003  
JENIS KELAMIN : Perempuan  
AGAMA : Islam  
NO. TELEPON : 082186652399  
EMAIL : [dyllalutfiaazzahra@gmail.com](mailto:dyllalutfiaazzahra@gmail.com)  
ALAMAT : Desa Cahyanegeri, Kecamatan Semendawai  
Suku III, Kabupaten Oku Timur

### RIWAYAT PENDIDIKAN

TAHUN 2009-2015 : SDN 1 Cahyanegeri  
TAHUN 2015-2018 : MTS Subulussalam 2  
TAHUN 2018-2021 : MA Subulussalam 2  
TAHUN 2021-2025 : Universitas Aisyiyah Palembang

## SURAT PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama lengkap : Dylla Lutfia Azzahra  
Tempat/tanggal lahir : Lampung Tengah, 14 Januari 2003  
Alamat : Desa Cahyanegeri, Kecamatan Semendawai Suku  
III, Kabupaten OKU Timur.  
Telpon/hp : 082186652399  
Judul penelitian : Eksplorasi Senyawa Potensial Anti Kanker Paru Dari Ekstrak  
Daun Kemang (*Mangifera caesia* J.) Dengan Metode  
*In Silico*  
Dipublikasikan : Universitas Aisyiyah Palembang

Dengan ini menyatakan dengan sebenarnya bahwa penelitian ini dibuat sendiri (bukan plagiat). Apabila kemudian hari memberikan pernyataan yang tidak benar sehubungan dengan pernyataan di atas, maka saya bersedia dituntut secara hukum.

Palembang, 13 Agustus 2025

Yang menyatakan



Dylla Lutfia Azzahra

NIM : 214820103007

**HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK  
KEPENTINGAN AKADEMIS**

Sebagai civitas Universitas Aisyiyah Palembang, saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Dylla Lutfia Azzahra

Nim : 214820103007

Program studi : S1-Farmasi

Jenis karya : Skripsi

Demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Universitas Aisyiyah Palembang Hak Bebas Royalty Noneksklusif (*Non- Exclusive Royalty- Free Right*) atas skripsi yang berjudul “Eksplorasi Senyawa Potensial Anti Kanker Paru Dari Ekstrak Daun Kemang (*Mangifera caesia* J.) Dengan Metode *In Silico*”. Dengan Hak Bebas *Royalty Noneksklusif* ini Universitas Aisyiyah Palembang berhak menyimpan, mengalih media/ formatkan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (*database*), merawat dan mempublikasikan tugas akhir saya selama tetap mencatumkan nama saya sebagai pemilik hak cipta. Demikianlah pernyataan saya buat dengan sebenarnya.

Dibuat di : Universitas Aisyiyah Palembang

Pada tanggal : 13 Agustus 2025

Yang menyatakan



Dylla Lutfia Azzahra

NIM : 214820103007

## KATA PENGANTAR



***Assalamu'alaikum. Warahmatullahi. Wabarakatuh.***

Dengan memanjatkan puji syukur kehadirat Allah SWT atas rahmat dan karunia-Nya sehingga yang berjudul “Eksplorasi Senyawa Potensial Anti Kanker Paru Dari Ekstrak Daun Kemang (*Mangifera caesia* J.) Dengan Metode *In Silico*” dapat diselesaikan tepat pada waktunya.

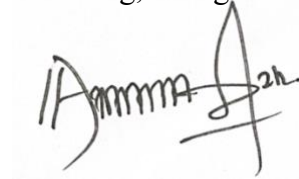
Skripsi ini dibuat dalam rangka untuk memenuhi salah satu syarat akademik untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi (S.Farm). Dalam penyusunan Skripsi ini peneliti banyak mengalami hambatan, namun berkat bimbingan dan bantuan dari berbagai pihak maka Skripsi ini dapat diselesaikan.

Pada kesempatan ini, peneliti ingin menyampaikan terimakasih kepada :

1. Khoirin, SKM., M.Kes. selaku Rektor Universitas Aisyiyah Palembang yang telah memberikan sarana dan prasana sehingga studi penulis berjalan dengan lancar.
2. Ns. Miming Oyandi, S.Kep, M.Kes, M.Kep, Ph.D selaku Dekan Fakultas Kesehatan dan Teknologi yang telah memberikan fasilitas, dukungan, serta kebijakan yang sangat membantu selama penulis menjalani studi hingga proses penyusunan skripsi ini.
3. apt. Onny Indriani M.Farm selaku ketua program studi S1 Farmasi sekaligus dosen penguji II yang telah memberi arahan, dukungan, serta waktu bagi penulis dalam menyelesaikan skripsi.
4. Dr. apt. Shaum Shiyani, M.Sc selaku Dosen Pembimbing I yang berkenan mengarahkan, meluangkan waktu, pikiran serta tenaga untuk memberikan bimbingan selama menyelesaikan skripsi ini.
5. Intan Trisakti M.Farm selaku Dosen Pembimbing II yang telah bersedia meluangkan waktu untuk membantu menyelesaikan skripsi ini.
6. Ibu apt. Galih Pratiwi, M.Pharm.,Sci. selaku penguji II yang telah meluangkan waktu dan memberikan saran.
7. Bapak Yanto dan Ibu Fardiana tercinta atas segala bantuan, bimbingan, dorongan serta do'a restu yang diberikan kepada saya selama penyusunan skripsi.
8. Teman-teman sekalian angkatan 2021 atas segala bantuan dan kerja samanya.

Penulis memahami bahwa skripsi ini masih memiliki banyak kekurangan untuk itu penulis mengharapkan kritik dan saran yang membangun. Penulis berharap skripsi ini dapat bermanfaat bagi semua. Akhirnya penulis mengucapkan terimakasih atas segala dukungan dan bantuan sehingga skripsi ini dapat disusun dengan baik.

Palembang, 13 Agustus 2025

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Amma S.', with a stylized flourish at the end.

Peneliti

**UNIVERSITAS AISYIYAH PALEMBANG**  
**FAKULTAS KESEHATAN DAN TEKNOLOGI**  
**PROGRAM STUDI FARMASI**

**Skripsi, 13 Agustus 2025**

Dylla Lutfia Azzahra

**EKSPLORASI SENYAWA POTENSIAL ANTI KANKER PARU DARI EKSTRAK DAUN  
KEMANG (*Mangifera caesia* J.) DENGAN METODE *IN SILICO***

XX, 109 Halaman, 18 Tabel, 16 Gambar, 18 Daftar Singkatan, 15 Lampiran

**ABSTRAK**

**Latar belakang :** Kanker paru-paru (*bronchogenic carcinomas*) merupakan suatu keganasan yang berasal dari dalam jaringan epitel paru dan saluran udara *broncheal*. pengobatan kanker seperti kemoterapi dapat meningkatkan efektivitas terapi, tetapi pasien tetap menghadapi dampak signifikan dari penyakit dan pengobatannya. Oleh karena itu, perlu dicari obat efektif, efek samping yang relatif rendah dan harga yang relatif murah. Salah satunya menggunakan bahan alam seperti daun kemang (*mangifera kemanga* J.). **Tujuan :** Penelitian ini dimaksudkan untuk menyelidiki bahan aktif utama dan mekanisme yang melibatkan *Mangifera caesia* J. dalam penyembuhan kanker paru menggunakan pendekatan *network pharmacology* dan *molecular docking*. **Metode :** Penelitian eksperimental dengan rancangan komputasi *cloud computing*. Penelitian ini meliputi penyiapan ekstrak (pengambilan sampel, pembuatan simplisia, dan pembuatan ekstrak), analisis senyawa fitokimia dengan LC-HRMS. Analisis *in silico* berupa perangkat lunak meliputi Cytoscape 3.8.2, Autodock Vina 1.2.3, Mgltools 1.5.7, OpenBabel 2.4.1, Git-Bash, LigPlot, dan PyMOL. **Hasil :** Hasil dari *network pharmacology* mengidentifikasi senyawa *staurosporine*, *methionine*, dan *tyrosin* sebagai senyawa yang berpotensi dalam penyembuhan kanker paru. Target protein utama dalam penyembuhan meliputi GAPDH, AKT1, EGFR, SCR, dan TP53. Hasil *molecular docking* menunjukkan senyawa *myricetin*, *quercetin*, dan *naringenin* memiliki aktivitas biologis yang sama dengan senyawa pembanding (gefitinib) dalam penyembuhan kanker paru dengan cara menghambat dan menginhibisi reseptor GAPDH, AKT1, EGFR, SCR, dan TP53. **Kesimpulan :** Berdasarkan uraian diatas dapat disimpulkan bahwa senyawa *myricetin*, *quercetin*, dan *naringenin* memiliki aktivitas biologis yang sama dengan senyawa pembanding (gefitinib) dalam penyembuhan kanker paru.

**Kata Kunci:** *Mangifera caesia*, kanker paru, penyembuhan kanker, *network pharmacology*, *molecular docking*.

**UNIVERSITY ‘AISYIYAH PALEMBANG  
FACULTY OF HEALTH AND TECHNOLOGY  
PHARMACY STUDY PROGRAM**

**Skripsi, 13 Agustus 2025**

Dylla Lutfia Azzahra

**EXPLORATION OF POTENTIAL ANTI-LUNG CANCER COMPOUNDS FROM  
KEMANG LEAF EXTRACT (*Mangifera caesia* J.) USING THE *IN SILICO* METHOD.**

XX, 109 Pages, 14 Tables, 15 Figures, 18 Abbreviations, 15 Appendices

**ABSTRACT**

**Background:** Lung cancer (bronchogenic carcinomas) is a malignancy originating from the epithelial tissue of the lungs and bronchial airways. Cancer treatments such as chemotherapy can increase the effectiveness of therapy, but patients still face significant impacts from the disease and its treatment. Therefore, it is necessary to find effective drugs, relatively low side effects and relatively low prices. One of them uses natural ingredients such as kemang leaves (*Mangifera kemanga* J.). **Objective:** This study is intended to investigate the main active ingredients and mechanisms involving *Mangifera caesia* J. in curing lung cancer using a network pharmacology and molecular docking approach. **Methods:** Experimental research with a cloud computing design. This study includes extract preparation (sampling, making simplicia, and making extracts), analysis of phytochemical compounds with LC-HRMS. In silico analysis in the form of software includes Cytoscape 3.8.2, Autodock Vina 1.2.3, Mgltools 1.5.7, OpenBabel 2.4.1, Git-Bash, LigPlot, and PyMOL. **Results:** The results of network pharmacology identified myricetin, quercetin, and naringenin compounds as compounds that have the potential to cure lung cancer. The main protein targets in healing include GAPDH, AKT1, EGFR, SCR, and TP53. Molecular docking results show that staurosporine, methionine, and tyrosin compounds have the same biological activity as the reference compound (gefitinib) in curing lung cancer by inhibiting and inhibiting the GAPDH, AKT1, EGFR, SCR, and TP53 receptors. **Conclusion:** Based on the description above, it can be concluded that myricetin, quercetin, and naringenin compounds have the same biological activity as the reference compound (gefitinib) in curing lung cancer.

**Keyword:** *Mangifera caesia*, lung cancer, cancer cure, network pharmacology, molecular docking

## DAFTAR ISI

HALAMAN SAMPUL .....	i
HALAMAN JUDUL .....	ii
HALAMAN PENGESAHAN.....	iv
SURAT PERNYATAAN .....	ix
DAFTAR RIWAYAT HIDUP .....	viii
KATA PENGANTAR.....	xii
ABSTRAK.....	xii
ABSTRAC .....	xiv
DAFTAR ISI.....	xv
DAFTAR TABEL.....	xvi
DAFTAR GAMBAR .....	xvii
DAFTAR LAMPIRAN .....	xix
DAFTAR SINGKATAN.....	xxi
<b>BAB I PENDAHULUAN .....</b>	<b>1</b>
A. Latar Belakang .....	1
B. Rumusan Masalah .....	1
C. Tujuan Penelitian .....	3
D. Manfaat Penelitian.....	3
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....</b>	<b>4</b>
A. Tinjauan Pustaka.....	4
1. Tanaman Kemang .....	4
2. Kanker Paru.....	7
3. Senyawa Pembanding .....	12
4. <i>Network Pharmacology</i> .....	13
5. <i>Molecular Docking</i> .....	14
6. Sumber Informasi Data Base.....	15
7. Aplikasi Perangkat Lunak .....	15
<b>BAB III METODE PENELITIAN.....</b>	<b>18</b>
A. Jenis Penelitian .....	18
B. Waktu dan Tempat Penelitian.....	18

C. Variabel Penelitian .....	18
1. Variabel Bebas .....	18
2. Variabel Terkendali .....	18
3. Variabel Terikat .....	18
D. Alat dan Bahan .....	19
1. Alat .....	19
2. Bahan.....	19
E. Jalannya Penelitian .....	20
1. Eksplorasi Komponen Senyawa Daun Kemang dan Target Potensial .....	21
2. Analisis Interaksi Senyawa dengan Pendekatan <i>Network Pharmacology</i> .....	22
3. <i>Molecular Docking</i> .....	25
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN .....</b>	<b>27</b>
A. Eksplorasi Komponen Senyawa dari Daun Kemang dan Target Potensial yang Berkaitan dengan Terapi Kanker Paru .....	27
1. Karakteristik Ekstrak Daun Kemang .....	27
2. Hasil Prediksi Aktivitas Senyawa Metabolit Menggunakan PASS ONLINE.....	30
3. Hasil Prediksi Target Senyawa melalui <i>Swiss Target Prediction</i> .....	31
B. Analisis Interaksi Molekuler Senyawa Dengan Target Potensial Dalam Penyembuhan Kanker Paru Berbasis <i>Network Pharmacology</i> .....	34
1. Hasil Interaksi Protein-Protein Menggunakan STRING .....	34
2. Identifikasi Jalur Persinyalan Penyembuhan Kanker Paru Melalui <i>KEGG Pathway</i> .....	34
3. Hasil Interaksi Protein-Senyawa (CPI) menggunakan STITCH.....	40
4. Visualisasi Hasil Analisa <i>Network Pharmacology</i> Menggunakan <i>Cytoscape</i> .....	41
C. Mekanisme Daun Kemang sebagai Agen Penyembuhan Kanker Paru melalui Pendekatan <i>In Silico</i> Studi Komputasi.....	46
1. <i>Moleccular Docking</i> .....	46
2. Analisis Hasil <i>Docking</i> .....	54
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN .....</b>	<b>58</b>
A. Kesimpulan.....	58
B. Saran.....	58
<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>	<b>59</b>
<b>LAMPIRAN.....</b>	<b>67</b>

## DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Kemang dan Potensi Bagian Kemang .....	7
Tabel 2.2 Data <i>In Silico Lung Cancer</i> .....	13
Tabel 3.1 Laporan Hasil Uji Lab .....	19
Tabel 3.2 Hasil Determinasi Kemang.....	20
Tabel 4.1 Hasil Karakteristik Parameter Spesifik Ekstrak Daun Kemang.....	28
Tabel 4.2 Hasil LC-HRMS tertinggi yang berkaitan dengan aktivitas biologis kanker paru	29
Tabel 4.3 Interaksi Target STMDK dan STPKP.....	32
Tabel 4.4 Hasil Analisis PPI Menggunakan STING.....	35
Tabel 4.5 Pemetaan Protein Target Berdasarkan <i>Pathway</i> Penyembuhan Kanker .....	36
Tabel 4.6 Hasil Analisis CPI Menggunakan STITCH .....	41
Tabel 4.7 Hasil Analisis PPI <i>Network Pharmacology</i> dengan <i>Cytoscape</i> .....	42
Tabel 4.8 Hasil Analisis CPI <i>Network Pharmacology</i> dengan <i>Cytoscape</i> .....	44
Tabel 4.9 Data Reseptor yang Digunakan dalam <i>Docking</i> .....	46
Tabel 4.10 Daftar Struktur 2D dan 3D.....	48
Tabel 4.11 Hasil Prediksi Sifat Fisikokimia.....	49
Tabel 4.12 Hasil Validasi Metode atau <i>Redocking</i> .....	51
Tabel 4.13 Hasil <i>Cross Docking</i> Senyawa Uji .....	52
Tabel 4.14 Hasil Residu Asam Amino .....	55
Tabel 4.15 Hasil Visualisasi 2D dan 3D Interaksi Residu Asam Amino.....	56

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Daun Kemang.....	4
Gambar 2.2 Mofologi Daun kemang .....	6
Gambar 2.3 Klasifikasi Kanker Paru NSCLC.....	10
Gambar 2.4 Proses Karsinogenesis .....	11
Gambar 2.5 Proses Metastasis.....	11
Gambar 3.1 Diagram Alir Penelitian.....	22
Gambar 4.1 Hasil Kromatografi LC-HRMS Daun Kemang .....	29
Gambar 4.2 Interaksi Senyawa Target Metabolit Daun Kemang (STMDK) dan Senyawa Target Protein Kanker Paru (STPKP) .....	32
Gambar 4.3 Interaksi Protein-Protein Melalui STRING .....	34
Gambar 4.4 Interaksi Protein-Protein Melalui KEGG <i>Pathway</i> .....	35
Gambar 4.5 Jalur Persinyalan Lung Cancer.....	39
Gambar 4.6 Interaksi Senyawa Protein Melalui STITCH.....	40
Gambar 4.7 Visualisasi PPI <i>Network Pharmacology</i> dengan <i>Cytoscape</i> .....	41
Gambar 4.8 Visualisasi CPI <i>Network Pharmacology</i> dengan <i>Cytoscape</i> .....	43
Gambar 4.9 Visualisasi <i>Network Pharmacology</i> Daun Kemang Terhadap Penyembuhan Kanker Paru .....	45
Gambar 4.10 Visualisasi Hasil <i>Cross Docking</i> Senyawa Uji dengan Nilai <i>Binding affinity</i> Terendah .....	53

## DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Skema Kerja Umum .....	67
Lampiran 2. Skema <i>Network Pharmacology</i> .....	68
Lampiran 3. Skema <i>Molecular Docking</i> .....	69
Lampiran 4. Persentase Bobot Rendemen .....	70
Lampiran 5. Daftar Senyawa Fitokimia Daun Kemang Hasil Analisa dengan LC-HRMS.....	71
Lampiran 6. Hasil Prediksi Aktivitas Biologis Senyawa Daun Kemang melalui <i>PASS Online</i>	76
Lampiran 7. Hasil Prediksi Protein Target Senyawa Daun Kemang dengan <i>Swiss Target Prediction</i> .....	81
Lampiran 8. Hasil Prediksi Protein Target Paru dengan <i>GENECARDS</i> .....	84
Lampiran 9. Struktur 3D Reseptor.....	89
Lampiran 10. Hasil Visualisasi <i>Cross Docking</i> Menggunakan <i>Autodock Vina</i> .....	90
Lampiran 11. Hasil Nilai <i>Binding Affinity Cross Docking</i> Menggunakan <i>Autodock Vina</i> .....	95
Lampiran 12. Hasil Residu Asam Amino .....	100
Lampiran 13. Visualisasi 2D dan 3D Interaksi Residu Asam Amino .....	102
Lampiran 14. Formulir Pernyataan Selesai Revisi Skripsi .....	107
Lampiran 15. Formulir Bimbingan Skripsi.....	108

CPI : Interaksi protein-senyawa)  
BHA : Butyl Hidroksi Anosil  
BHT : Butyl Hidroksi Toluene  
Go : *Ontology Gen*  
KEGG : *Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes*  
LC-HRMS : *Liquid Chromatography High Resolution Mass Spectrofometry*  
NSCLC : *Non-Small Cell Lung Cancer*  
PDB : Protein Data Bank  
PASS : *Prediction of Activity Spectra for Substances*  
Pa : *Potential activity*  
Pi : *Potential Inhibitory*  
PPI : protein-protein interaksi  
RSMD : Root Mean Square Deviation  
SCLC : *Small Cell Lung Cancer*  
SMILES : *Simplified Molecular Input Line Entery Specification*  
TKI : *Tyrosinase Kinase Inhibitor*  
UAE : *Ultrasonic Assisted Extraction*  
WHO : *World Health Organization*