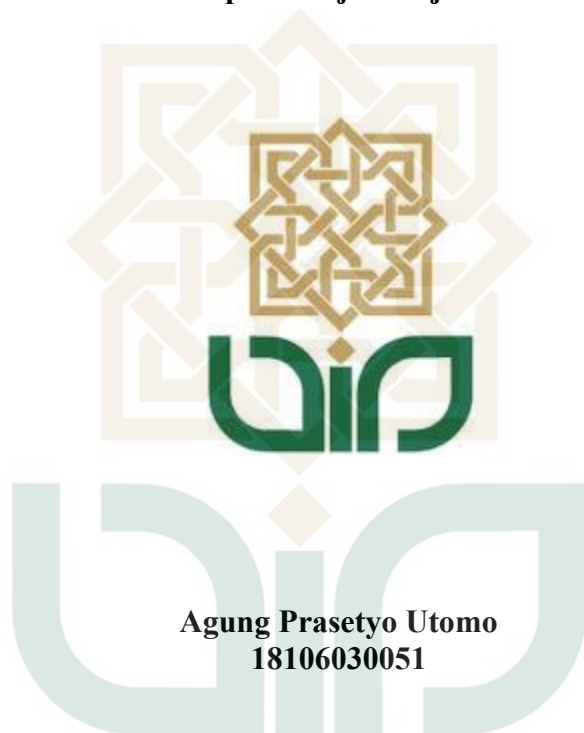


**STUDI KOMPUTASI INTERAKSI CURZERENONE, FURANODIENE,
DAN CURCUMENOL DENGAN RESEPTOR VEGFR-2 SEBAGAI
KANDIDAT TERAPI ANTIKANKER PARU-PARU**

**Skripsi
Untuk memenuhi sebagai persyaratan
Mencapai derajat Sarjana S-1**



**Agung Prasetyo Utomo
18106030051**

**STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA
PROGRAM STUDI KIMIA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA
2025**



PENGESAHAN TUGAS AKHIR

Nomor : B-2008/Un.02/DST/PP.00.9/08/2025

Tugas Akhir dengan judul : Studi komputasi interaksi Curzerenone, Furanodiene, dan Curamenol dengan reseptor VEGFR-2 sebagai kandidat terapi antikanker paru-paru

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama : AGUNG PRASETYO UTOMO
Nomor Induk Mahasiswa : 18106030051
Telah diujikan pada : Rabu, 27 Agustus 2025
Nilai ujian Tugas Akhir : A/B

dinyatakan telah diterima oleh Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

TIM UJIAN TUGAS AKHIR



Ketua Sidang
Karmanto, S.Si., M.Sc.
SIGNED

Valid ID: 68aff94338e3b



Penguji I
Prof. Dr. Maya Rahmayanti, S.Si. M.Si.
SIGNED

Valid ID: 68afecf72f404



Penguji II
Sudarlin, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 68afca2e0defe



Yogyakarta, 27 Agustus 2025
UIN Sunan Kalijaga
Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
Prof. Dr. Dra. Hj. Khurul Wardati, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 68affc3dd7c54



SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR

Hal : Persetujuan Skripsi / Tugas Akhir
Lamp :

Kepada
Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta
di Yogyakarta

Assalamu'alaikum wr. wb.

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta mengadakan perbaikan seperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi Saudara:

Nama : Agung Prasetyo Utomo
NIM : 18106030051
Judul Skripsi : STUDI KOMPUTASI INTERAKSI CURZERENONE, FURANODIENE, DAN CURCUMENOL
DENGAN RESEPTOR VEGFR-2 SEBAGAI KANDIDAT TERAPI ANTIKANKER PARU-PARU

sudah dapat diajukan kembali kepada Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam Program Studi Kimia.

Dengan ini kami mengharap agar skripsi/tugas akhir Saudara tersebut di atas dapat segera dimunaqasyahkan. Atas perhatiannya kami ucapkan terima kasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 26 Agustus 2025
Pembimbing

Karmanto, M.Sc
NIP: 19820504 200912 1 005

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Yang bertandatangan di bawah ini :

Nama : Agung Prasetyo Utomo
NIM : 18106030051
Jurusan : Kimia
Fakultas : Sains dan Teknologi

Menyatakan bahwa skripsi yang berjudul **“STUDI KOMPUTASI INTERAKSI CURZERENONE, FURANODIENE, DAN CURCUMENOL DENGAN RESEPTOR VEGFR-2 SEBAGAI KANDIDAT TERAPI ANTIKANKER PARU-PARU”** merupakan hasil penelitian saya sendiri, 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 orang lain, kecuali secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Yogyakarta, 27 Agustus 2025



Agung Prasetyo Utomo
NIM 18106030051

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

MOTTO

**So make the best of this test, and don't ask why
It's not a question, but a lesson learned in time
It's something unpredictable
But in the end, it's right
I hope you had the time of your life**

dikutip dari lagu *Good Riddance* milik *Greenday*



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

HALAMAN PERSEMBAHAN

Karya ini penulis persembahkan
Untuk almamater Program Studi Kimia
UIN Sunan Kalijaga



KATA PENGANTAR

Alhamdulillah, segala puji dan Syukur kehadiran Allah SWT atas segala limpahan nikmat, Rahmat, dan karunia-Nya. Shalawat serta salam senantiasa tercurah kepada Nabi Muhammad SAW, sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi berjudul “Studi Komputasi Interaksi Curzerenone, Furanodiene, dan Curamenol dengan Reseptor VEGFR-2 sebagai Kandidat Terapi Antikanker Paru-Paru” sebagai salah satu syarat untuk meraih gelar Sarjana.

Perjalanan Menyusun skripsi ini penuh dengan proses belajar, tantangan, dan pengalaman berharga sehingga penulis menyampaikan terima kasih yang tulus kepada:

1. Bapak Prof. Norhaidi Hasan, S.Ag., M.A., M Phil., Ph.D. selaku Rektor UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta
2. Ibu Prof. Dr. Dra. Hj. Khurul Wardati, M.Si selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta
3. Ibu Prof. Dr. Maya Rahmayanti, M.Si selaku Ketua Program Studi Kimia, Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta, atas motivasi dan arahan selama masa studi penulis hingga menyelesaikan skripsi
4. Bapak Karmanto, S.Si., M.Sc selaku dosen pembimbing yang sangat sabar membimbing, mengarahkan, dan memotivasi penulis dari awal penyusunan, penelitian, dan penyelesaian skripsi ini
5. Bapak Sudarlin, S.Si., M.Si selaku dosen pembimbing akademik yang selalu sabar memberi arahan selama masa studi penulis
6. Bapak Wijayanto, S.Si dan segenap PLP Laboratorium atas pendampingan selama penelitian berlangsung
7. Seluruh dosen dan pengajar Program Studi Kimia Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga yang telah memberikan ilmu yang bermanfaat
8. Kedua orang tua, Bapak Sugeng Purnomo dan Ibu Sugiyati serta adik tercinta Berliana Setyaningtyas yang senantiasa memberi doa dan semangat dalam mendukung penulis sampai skripsi ini selesai
9. Teman-teman Caffein Kimia 2018 terima kasih atas kebersamaan, doa, dan dukungannya
10. Teman-teman peserta Bentang Jawa, Audaxrandonesia, dan semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu per satu, terima kasih atas masukan, saran dan pembelajaran hidup untuk terus berkembang lebih baik
11. Untuk diri sendiri, terima kasih telah bertahan, berjuang, belajar, dan berusaha menyelesaikan skripsi ini

Penulis menyadari bahwa masih terdapat banyak kekurangan dan masih jauh dari kata sempurna. Oleh karena itu, kritik dan saran yang membangun sangat diharapkan. Semoga skripsi ini dapat memberi manfaat dan menjadi kontribusi kecil bagi ilmu pengetahuan di masa mendatang.

Yogyakarta, 20 Agustus 2025

Agung Prasetyo Utomo

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	i
SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR	ii
SURAT KEASLIAN SKRIPSI.....	iii
KATA PENGANTAR	vi
DAFTAR ISI.....	vii
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL.....	ix
DAFTAR LAMPIRAN.....	x
ABSTRAK.....	xi
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Batasan Masalah.....	5
C. Rumusan Masalah	5
D. Tujuan Penelitian.....	6
E. Manfaat Penelitian.....	6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN LANDASAN TEORI.....	7
A. Tinjauan Pustaka	7
B. Landasan Teori.....	13
C. Kerangka Berpikir dan Hipotesis Penelitian	26
BAB III METODE PENELITIAN.....	29
A. Waktu dan Tempat Penelitian	29
B. Alat dan Bahan Penelitian	29
C. Prosedur Kerja.....	29
BAB IV	31
HASIL DAN PEMBAHASAN.....	31
A. Analisis Farmakodinamik Interaksi Curzerenone, Furanodiene, dan Curamenol terhadap Reseptor VEGFR-2	31
B. Analisis Farmakokinetik dan Profil ADME Curzerenone, Furanodiene, dan Curamenol sebagai Kandidat Obat Antikanker Paru-paru.....	36
BAB V.....	40
PENUTUP.....	40
A. Kesimpulan.....	40
B. Saran.....	40
DAFTAR PUSTAKA	41
LAMPIRAN.....	43

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1. 1 Tanaman Kunyit Putih.....	19
Gambar 4. 1 Protein Target VEGFR2 (PDB ID: 3V2A).....	31
Gambar 4. 2 Hasil Docking Ligan Curzerenone terhadap Reseptor VEGFR-2..	33
Gambar 4. 3 Hasil Docking Ligan Furanodiene terhadap Reseptor VEGFR-2 ..	34
Gambar 4. 4 Hasil Docking Ligan Curcumenol terhadap Reseptor VEGFR-2...	35



DAFTAR TABEL

Tabel 2 1 Struktur Senyawa uji.....	12
Tabel 4. 1 Nilai Energi Ikatan (Binding Affinity) Ligan Curzerenone.....	33
Tabel 4. 2 Nilai Energi Ikatan (Binding Affinity) Ligan Furanodiene	34
Tabel 4. 3 Nilai Energi Ikatan (Binding Affinity) Ligan Curcumenol	35
Tabel 4. 4 Nilai Keseluruhan ΔG Curzerenone, Furanodiene, dan Curcumenol ..	36
Tabel 4. 5 Hasil Analisis SwissADME.....	38



DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran I. Preparasi Ligan dan Hasil Calculated Affinity Ligan	43
Lampiran II Hasil Interaksi Ligan dan Protein	45
Lampiran III. Evaluasi Sifat Fisiko Kimia dan Profil ADMET	51



ABSTRAK

STUDI KOMPUTASI INTERAKSI CURZERENONE, FURANODIENE, DAN CURCUMENOL DENGAN RESEPTOR VEGFR-2 SEBAGAI KANDIDAT TERAPI ANTIKANKER PARU-PARU

Oleh

Agung Prasetyo Utomo
NIM 18106030051

Pembimbing:
Karmanto, S.Si.,M.Sc.
NIP. 19820504 200912 1 005

Curzerenone, furanodiene, curcumenol merupakan senyawa metabolit sekunder dari golongan seskuiterpenoid yang banyak ditemukan pada Kunyit putih (*Curcuma zedoaria*). Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji bagaimana interaksi senyawa seskuiterpenoid tersebut terhadap reseptor VEGFR-2 melalui pendekatan farmakodinamik komputasional, dan mengevaluasi karakteristik fisikokimia dan farmakokinetiknya, sebagai kandidat obat antikanker paru paru. Analisis farmakodinamik dilakukan dengan memodelkan interaksi ligan-reseptor menggunakan webserver Swissdoc, sedangkan evaluasi potensi kelompok senyawa seskuiterpenoid tersebut sebagai kandidat obat antikanker paru-paru secara farmakokinetik dilakukan dengan menggunakan webserver SwissADME. Hasil analisis farmakodinamik melalui molecular docking menunjukkan bahwa curzerenone dan curcumenol memiliki afinitas pengikatan tinggi terhadap VEGFR-2 melalui ikatan hidrogen dan interaksi hidrofobik, sedangkan furanodiene menunjukkan afinitas sedang. Evaluasi farmakokinetik terhadap ketiga senyawa seskuiterpenoid tersebut juga menunjukkan bahwa curzerenone, curcumenol, dan furanodiene memenuhi aturan Lipinski, memiliki logP dan TPSA yang mendukung absorpsi oral, bioavailabilitas tinggi, dan potensi penetrasi Blood-Brain Barrier.

Kata kunci : Curzerenone, furanodiene, curcumenol, kanker paru-paru, VEGFR-

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Kanker merupakan salah satu penyebab utama kematian secara global dan terus mengalami peningkatan prevalensi setiap tahunnya. Menurut data *Global Cancer Observatory (GLOBOCAN)* tahun 2020, terdapat lebih dari 19 juta kasus kanker baru dan hampir 10 juta kematian akibat kanker di seluruh dunia (Sung et al., 2021). Di Indonesia sendiri, prevalensi kanker menunjukkan tren peningkatan, dan kanker paru-paru menempati urutan keenam sebagai penyebab kematian akibat kanker tertinggi, sehingga menuntut pengembangan terapi baru yang lebih aman, efektif, dan selektif

Pengobatan kanker secara konvensional seperti kemoterapi dan radioterapi memang efektif dalam membunuh sel kanker, namun seringkali disertai efek samping yang signifikan terhadap sel sehat, resistensi obat, dan tingginya biaya terapi (Kumari et al., 2021). Oleh karena itu, eksplorasi senyawa alami dari tanaman obat sebagai kandidat antikanker menjadi alternatif strategis dalam penemuan obat baru. Salah satu tanaman herbal yang memiliki potensi adalah rumput teki (*Cyperus rotundus*), yang secara etnofarmakologis telah digunakan dalam pengobatan tradisional di berbagai negara Asia, termasuk Indonesia.

Dalam dekade terakhir, penelitian fitofarmaka mengalami perkembangan pesat. Tanaman obat menjadi fokus utama dalam pencarian agen antikanker karena sifatnya yang relatif aman, memiliki efek multi-target, serta potensi untuk

mengurangi efek samping dibandingkan agen kemoterapi sintetik (Cragg & Pezzuto, 2016). Beberapa senyawa alami, seperti paklitaksel dari *Taxus brevifolia* dan vinkristin dari *Catharanthus roseus*, bahkan telah berhasil dikembangkan menjadi obat kanker yang digunakan secara luas di klinik (Newman & Cragg, 2020). Hal ini menunjukkan bahwa eksplorasi senyawa aktif dari tanaman merupakan langkah yang sangat relevan dan berpotensi memberikan kontribusi signifikan bagi pengembangan terapi kanker.

Salah satu tanaman yang menarik perhatian peneliti adalah kunyit putih (*Curcuma zedoaria*), anggota famili Zingiberaceae yang telah lama digunakan dalam pengobatan tradisional di Asia, termasuk Indonesia. Secara morfologi, kunyit putih memiliki rimpang berwarna putih kekuningan dengan aroma khas dan rasa agak pahit. Dalam pengobatan tradisional, kunyit putih digunakan untuk mengatasi masalah pencernaan, nyeri, peradangan, dan sebagai penawar racun (Jang et al., 2004). Berbagai penelitian telah mengungkapkan bahwa rimpang kunyit putih mengandung beragam senyawa bioaktif, seperti kurkuminoid, seskuiterpen, dan monoterpen, yang memiliki aktivitas antimikroba, antiinflamasi, antioksidan, serta antikanker (Chen et al., 2017).

Rimpang kunyit putih (*Curcuma zedoaria*), anggota suku Zingiberaceae, telah lama digunakan dalam pengobatan tradisional Asia Tenggara sebagai antiinflamasi, antimikroba, dan antitumor. Beberapa kajian phytochemical menunjukkan kehadiran senyawa seskuiterpen, kurkuminoid, flavonoid, serta fenolik yang memiliki potensi aktivitas antikanker melalui mekanisme apoptosis, hambatan proliferasi sel, dan modulasi jalur sinyal seluler (Li et al., 2022; Wang

et al., 2021). Di era digital saat ini, pendekatan kemoinformatika dan bioinformatika menawarkan solusi strategis untuk menyaring dan memprediksi potensi senyawa aktif secara cepat dan hemat biaya. Pendekatan ini melibatkan penggunaan data komputasi untuk memodelkan interaksi senyawa dengan target protein yang berperan dalam patogenesis kanker.

Aktivitas antikanker kunyit putih telah dilaporkan dalam sejumlah studi *in vitro* dan *in vivo*. Misalnya, seskuiterpen seperti curzerenone dan furanodiene dilaporkan mampu menginduksi apoptosis pada sel kanker, menghambat proliferasi, serta menekan angiogenesis tumor (Itokawa et al., 2008; Raina et al., 2016). Selain itu, kurkuminoid pada kunyit putih menunjukkan potensi sebagai agen kemopreventif melalui modulasi jalur sinyal seluler, seperti NF- κ B, p53, dan jalur MAPK (Sikha et al., 2020). Dengan demikian, identifikasi senyawa aktif dalam kunyit putih dan pemahaman mekanisme kerjanya menjadi langkah penting dalam pengembangan obat berbasis bahan alam untuk terapi kanker.

Teknologi analisis kimia modern memungkinkan identifikasi komponen bioaktif dalam tanaman secara lebih akurat. Salah satu metode yang umum digunakan adalah *Gas Chromatography Mass Spectrometry* (GC-MS), yang mampu memisahkan, mengidentifikasi, dan mengkuantifikasi senyawa volatil dalam ekstrak tanaman dengan sensitivitas tinggi (Sparkman et al., 2011). Melalui analisis GC-MS, peneliti dapat memperoleh profil fitokimia dari kunyit putih secara komprehensif, yang kemudian dapat digunakan sebagai dasar untuk kajian lebih lanjut. Selain analisis kimia, perkembangan ilmu komputasi telah membawa perubahan signifikan dalam proses penemuan obat (drug discovery). Pendekatan

farmakokinetik secara *in silico* memungkinkan prediksi sifat fisikokimia, kelayakan obat (*drug-likeness*), serta parameter ADMET (*Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion, Toxicity*) dari senyawa (Daina et al., 2017; Pires et al., 2015). Sementara itu, analisis farmakodinamik melalui teknik *molecular docking* dapat digunakan untuk memprediksi interaksi senyawa dengan target protein yang berperan dalam perkembangan kanker (Meng et al., 2011). Integrasi kedua analisis ini memberikan pendekatan komprehensif untuk menyaring dan mengevaluasi potensi senyawa bioaktif kunyit putih sebelum dilakukan pengujian biologis lebih lanjut.

Meskipun penelitian mengenai kunyit putih dan aktivitas antikankernya telah dilakukan, sebagian besar studi masih terbatas pada uji *in vitro* atau pengamatan efek farmakologis secara umum. Kajian yang secara khusus mengevaluasi interaksi senyawa aktif melalui analisis farmakodinamik dengan *molecular docking* serta profil farmakokinetik menggunakan ADMET masih terus dilakukan, khususnya di Indonesia. Pendekatan ini penting karena dapat memberikan pemahaman mekanistik yang lebih mendalam mengenai potensi senyawa sebagai kandidat obat, sekaligus mempercepat proses pengembangan obat dan meminimalkan penggunaan hewan uji pada tahap awal penelitian.

Berdasarkan uraian tersebut, penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi senyawa bioaktif dalam rimpang kunyit putih seperti Curzerenone, Furanodiene dan Curcumenol serta mengevaluasi sifat farmakodinamiknya melalui analisis *molecular docking* dan profil farmakokinetik menggunakan ADMET. Penelitian ini menilai potensi senyawa aktif dalam kunyit

putih sebagai agen antikanker melalui pendekatan komputasi farmakodinamik dan farmakokinetik. Dengan memanfaatkan teknologi komputasi, penelitian ini diharapkan dapat memberikan data awal yang menjadi dasar untuk pengembangan kandidat obat antikanker berbasis bahan alam, sekaligus mendukung pemanfaatan metode komputasi dalam penemuan obat. Hasil penelitian ini diharapkan memberikan kontribusi ilmiah bagi pengembangan agen antikanker berbasis bahan alam serta menjadi landasan bagi penelitian lanjutan secara *in vitro* dan *in vivo*.

B. Batasan Masalah

Batasan masalah untuk penelitian ini adalah :

1. Ligan uji yang digunakan yaitu senyawa dalam kunyit putih berupa golongan sesquiterpenoid yaitu curzerenone, furanodiene dan curcumenol
2. Protein target (reseptor) yang digunakan yaitu Vascular Endothelial Growth Factor Receptor-2 (VEGFR-2) (PDB ID: 3V2A)
3. Molecular docking ligan uji dengan reseptor VEGFR-2 menggunakan *Autodock Vina*
4. Penelitian ini terbatas pada studi *in silico*, evaluasi sifat fisikokimia dan prediksi ADMET

C. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang masalah, dapat diperoleh rumusan permasalahan sebagai berikut :

1. Bagaimana karakteristik farmakodinamik dan farmakokinetik senyawa-senyawa tersebut berdasarkan analisis molecular docking dan ADMET?
2. Bagaimana interaksi molekuler senyawa-senyawa tersebut dengan target protein kanker kunci?

D. Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk :

1. Analisis farmakodinamik senyawa bioaktif Curzerenone, Furanodiene, dan Curcumenol terhadap protein target VEGFR-2 melalui molecular docking dengan menilai parameter binding affinity..
2. Analisis farmakokinetik, senyawa bioaktif Curzerenone, Furanodiene, dan Curcumenol melalui pendekatan ADMET berdasarkan parameter *binding affinity* untuk memprediksi profil absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, dan toksisitas.

E. Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan mampu berkontribusi dalam pengembangan ilmu di bidang kemoinformatika dan bioinformatika, khususnya dalam eksplorasi senyawa bioaktif dari tanaman obat sebagai kandidat obat antikanker.

BAB V PENUTUP

A. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian mengenai studi komputasi interaksi curzerenone, furanodiene, dan curamenol dengan reseptor VEGFR-2 sebagai kandidat terapi antikanker paru-paru, dapat ditarik beberapa kesimpulan:

1. Analisis farmakodinamik menunjukkan bahwa Curzerenone dan Curcumenol memiliki afinitas tinggi terhadap VEGFR-2, menandai potensi mereka sebagai kandidat utama untuk menghambat angiogenesis pada kanker.
2. Analisis farmakokinetik mengungkapkan bahwa semua senyawa utama memiliki profil ADMET yang baik, mendukung absorpsi oral, penetrasi ke otak, dan minim toksisitas, sehingga berpotensi sebagai obat antikanker paru-paru.

B. Saran

1. Perlu dilakukan molecular docking senyawa lain terhadap protein target VEGFR-2 yang berkontribusi dalam kanker di mana ia mendorong pertumbuhan tumor dengan meningkatkan suplai oksigen dan nutrisi.
2. Perlunya dilakukan simulasi Molecular Dynamics untuk mengetahui stabilitas kompleks kandidat terbaik terhadap protein target VEGFR-2
3. Perlunya dilakukan studi in vivo dan in vitro senyawa kandidat terbaik yaitu untuk validasi lebih lanjut

DAFTAR PUSTAKA

- Ali, A., Ahmed, S., & Khan, A. (2020). Computational approaches in drug discovery: opportunities and challenges. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 98, 107600. <https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2020.107600>
- Alasmari, F., Alharbi, M., & Bukhari, S. (2021). Molecular docking studies in drug design and development. *Saudi Pharmaceutical Journal*, 29(9), 1151–1160. <https://doi.org/10.1016/j.jsps.2021.08.004>
- Asmara, Oke Dimas et al. 2023. “Lung Cancer in Indonesia.” *Journal of Thoracic Oncology* 18(9): 1134–45.
- Astuti, R., & Nurhasnawati, H. (2017). Aktivitas sitotoksik ekstrak etanol rimpang kunyit putih (*Curcuma zedoaria*) terhadap sel kanker payudara T47D. *Jurnal Ilmiah Farmasi*, 13(2), 89–96.
- Choudhury, A., & Kumar, S. (2016). Molecular docking: A structure-based drug designing approach. *Journal of Bioinformatics and Intelligent Control*, 5(4), 1–7. <https://doi.org/10.6026/97320630012965>
- Gupta, S., Kumar, A., & Sharma, R. (2019). An introduction to molecular docking. *Bioinformation*, 15(5), 421–426. <https://doi.org/10.6026/97320630015421>
- Hanahan, D., & Weinberg, R. A. (2011). Hallmarks of cancer: The next generation. *Cell*, 144(5), 646–674. <https://doi.org/10.1016/j.cell.2011.02.013>
- Harborne, J. B. (1998). *Phytochemical Methods: A Guide to Modern Techniques of Plant Analysis* (3rd ed.). Chapman and Hall.
- Jantan, I., Saputri, F. C., & Qaisar, M. N. (2012). *Curcuma zedoaria*: Traditional uses, phytochemistry, and pharmacological activities. *Journal of Natural Medicines*, 66(3), 331–342. <https://doi.org/10.1007/s11418-011-0606-1>
- Kaur, H., Arora, R., & Singh, M. (2020). Role of molecular docking in drug discovery. *International Journal of Drug Development and Research*, 12(1), 1–6.
- Kumar, V., Abbas, A. K., & Aster, J. C. (2020). *Robbins and Cotran Pathologic Basis of Disease* (10th ed.). Elsevier.
- La’ah, Anita Silas, and Shih Hwa Chiou. 2024. “Cutting-Edge Therapies for Lung Cancer.” *Cells* 13(5).
- Lee, H. S., Kim, M. R., & Lee, J. (2018). Phytochemical constituents and biological activities of *Curcuma zedoaria*. *Food Science and Biotechnology*, 27(2), 379–389. <https://doi.org/10.1007/s10068-017-0275-4>
- Nugroho, A. E., & Ikawati, Z. (2019). Kemoinformatika dalam penemuan obat berbasis bahan alam. *Jurnal Farmasi Indonesia*, 13(1), 1–12.
- Prakash, O., Kumar, A., & Kumar, P. (2019). Application of chemoinformatics in drug discovery. *Current Topics in Medicinal Chemistry*, 19(6), 444–455. <https://doi.org/10.2174/1568026619666190206151812>

- Sari, N., & Yuliani, N. N. (2020). Potensi antikanker ekstrak etanol *Curcuma zedoaria* melalui mekanisme apoptosis pada sel kanker HeLa. *Jurnal Fitofarmaka Indonesia*, 7(1), 23–31.
- Suryaningsih, R., & Mahfud, M. (2016). Identifikasi senyawa aktif ekstrak rimpang kunyit putih dengan GC-MS. *Jurnal Kimia Riset*, 1(2), 45–52.
- Trott, O., & Olson, A. J. (2010). AutoDock Vina: Improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading. *Journal of Computational Chemistry*, 31(2), 455–461. <https://doi.org/10.1002/jcc.21334>
- Wibowo, F., & Hidayat, T. (2021). Bioinformatika dalam penelitian kanker: Aplikasi dan prospek. *Jurnal Kedokteran Indonesia*, 12(3), 211–220.
- Xu, X., Zhang, W., Huang, C., Li, Y., Yu, H., Wang, Y., & Duan, J. (2012). A novel chemoinformatics approach to analyze the molecular networks of traditional Chinese medicines. *Frontiers in Pharmacology*, 3, 1–7. <https://doi.org/10.3389/fphar.2012.00113>
- Zhang, Q., Ma, X., & Wang, C. (2020). Integration of chemoinformatics and bioinformatics to advance drug discovery. *Drug Discovery Today*, 25(9), 1638–1647. <https://doi.org/10.1016/j.drudis.2020.06.020>
- Zhao, Y. Y., Feng, Y. L., & Du, X. (2010). Chemical constituents of *Curcuma zedoaria* and their bioactivities. *Chemistry & Biodiversity*, 7(8), 2023–2042. <https://doi.org/10.1002/cbdv.200900393>

