

**POTENSI SENYAWA FENILPROPANOID RIMPANG
LENGKUAS (*Alpinia galanga* (L.) Willd.) DALAM
MENGHAMBAT PROTEIN BCL-2 SEBAGAI TERAPI
ANTIANKER DENGAN PENDEKATAN MOLECULAR
DOCKING**



SKRIPSI

**Oleh:
ANITA SOFIANA PUTRI
42121023**

**PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS PERADABAN
SEPTEMBER 2025**

**POTENSI SENYAWA FENILPROPANOID RIMPANG
LENGKUAS (*Alpinia galanga* (L.) Willd.) DALAM
MENGHAMBAT PROTEIN BCL-2 SEBAGAI TERAPI
ANTIANKER DENGAN PENDEKATAN MOLECULAR
DOCKING**



SKRIPSI

**Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat mencapai
Derajat Sarjana Farmasi (S. Farm)**

**Oleh:
ANITA SOFIANA PUTRI
42121023**

**PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS PERADABAN
SEPTEMBER 2025**

PERNYATAAN PENULIS

JUDUL : POTENSI SENYAWA FENILPROPANOID RIMPANG
LENGKUAS (*Alpinia galanga* (L.) Willd.) DALAM
MENGHAMBAT PROTEIN BCL-2 SEBAGAI TERAPI
ANTIANKER DENGAN PENDEKATAN MOLECULAR
DOCKING

NAMA : ANITA SOFIANA PUTRI

NIM : 42121023

Saya menyatakan dan bertanggungjawab dengan sebenarnya bahwa Skripsi ini adalah karya saya sendiri kecuali cuplikan dan ringkasan yang masing-masing telah saya jelaskan sumbernya. Jika pada waktu selanjutnya ada pihak lain yang mengklaim bahwa Skripsi ini sebagai karyanya, yang disertai dengan bukti-bukti yang cukup, maka saya bersedia untuk dibatalkan gelar Sarjana Farmasi saya beserta segala hak dan kewajiban yang melekat pada gelar tersebut.

Bumiayu, 13 September 2025

Penulis



ANITA SOFIANA PUTRI

NIM. 42121023

PERSETUJUAN SKRIPSI

JUDUL : POTENSI SENYAWA FENILPROPANOID RIMPANG
LENGKUAS (*Alpinia galanga* (L.) Willd.) DALAM
MENGHAMBAT PROTEIN BCL-2 SEBAGAI TERAPI
ANTIANKER DENGAN PENDEKATAN MOLECULAR
DOCKING
NAMA : ANITA SOFIANA PUTRI
NIM : 42121023

Skripsi ini telah diperiksa dan disetujui
Bumiayu, 04 Agustus 2025

Mengetahui,

Pembimbing I



Syaiful Prayogi, M.Farm.
NIDN. 0602119303

Pembimbing II



Eka Trisnawati, M.Pd.
NIDN. 0615068803

Ketua Program Studi,



Syaiful Prayogi, M.Farm.
NIDN. 0602119303

PENGESAHAN SKRIPSI

JUDUL : POTENSI SENYAWA FENILPROPANOID RIMPANG LENGKUAS (*Alpinia galanga* (L.) Willd.) DALAM MENGHAMBAT PROTEIN BCL-2 SEBAGAI TERAPI ANTIKANKER DENGAN PENDEKATAN MOLECULAR DOCKING

NAMA : ANITA SOFIANA PUTRI

NIM : 42121023

Skripsi ini telah diujikan dan dipertahankan di depan Dewan Penguji pada Sidang Skripsi tanggal 10 Agustus 2025. Menurut pandangan kami, skripsi ini memadai dari segi kualitas untuk tujuan penganugerahan gelar Sarjana Farmasi (S. Farm) Bumiayu, 28 Agustus 2025

Nama Penguji

Tanda tangan

1. apt. Ubun Fadli Serahli, M.Farm.

NIDN. 0605029102

2. apt. Baedi Mulyanto, S.Farm., M.H.

NIDN. 0604058803

3. Syaiful Prayogi, M.Farm.

NIDN. 0602119303

4. Eka Trisnawati, M.Pd.

NIDN. 0615068803

Mengetahui,

Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
Universitas Peradaban

Rizki Noor Prasetyono, M.Pd.

NIDN. 0611099101

Ketua Program Studi Farmasi

Syaiful Prayogi, M. Farm.

NIDN. 0602119303

ABSTRACT

ANITA SOFIANA PUTRI. 2025. *THE POTENTIAL OF PHENYLPROPANOID COMPOUNDS FROM ALPINIA GALANGA (L.) WILLD. IN INHIBITING BCL-2 PROTEIN AS AN ANTICANCER THERAPY THROUGH A MOLECULAR DOCKING APPROACH.* THESIS. PHARMACY STUDY PROGRAM. PERADABAN UNIVERSITY. Syaiful Prayogi, Eka Trisnawati.

*Cancer is one of the non-communicable diseases with increasing incidence and mortality rates worldwide. The long-term use of synthetic drugs carries the risk of resistance, thereby necessitating the development of alternative therapies based on natural compounds. Phenylpropanoid compounds from the rhizome of galangal (*Alpinia galanga* (L.) Willd.) have been reported to possess potential as anticancer therapeutic candidates, targeting the B-Cell Lymphoma 2 (BCL-2) protein, which plays a role in inhibiting cancer cell apoptosis. This study employed a molecular docking approach to evaluate the interaction of galangal phenylpropanoids with the BCL-2 protein and to analyze their pharmacokinetic and toxicity profiles as potential anticancer candidates. The research stages included compound modeling and energy minimization, BCL-2 protein preparation, docking validation, docking process, interaction visualization, data analysis, and ADMET prediction. The results showed that Galanganol C was the best compound, with a binding energy of -9.4 kcal/mol and an inhibition constant of 0.128 μ M. Galanganol C formed hydrogen bonds (ASP111) and hydrophobic interactions (MET115, ALA149, LEU137), which were comparable to those of the native ligand within the BCL-2 protein. The One Sample Wilcoxon Signed Rank Test indicated that Galanganol C did not show a significant difference ($p > 0.05$) compared to the native ligand, suggesting that its binding affinity is statistically equivalent. ADMET predictions demonstrated that Galanganol C exhibited favorable pharmacokinetic and toxicity profiles across parameters. Therefore, it can be concluded that Galanganol C has the potential to be further developed as an anticancer candidate through the inhibition of BCL-2.*

Keywords: cancer, galanga rhizome, phenylpropanoid, BCL-2, molecular docking, ADMET.

ABSTRAK

ANITA SOFIANA PUTRI. 2025. POTENSI SENYAWA FENILPROPANOID RIMPANG LENGKUAS (*Alpinia galanga* (L.) Willd.) DALAM MENGHAMBAT PROTEIN BCL-2 SEBAGAI TERAPI ANTIKANKER MELALUI PENDEKATAN MOLECULAR DOCKING. SKRIPSI. PROGRAM STUDI FARMASI. UNIVERSITAS PERADABAN. Syaiful Prayogi, Eka Trisnawati.

Kanker merupakan salah satu penyakit tidak menular dengan angka kejadian dan kematian yang semakin tinggi di seluruh dunia. Penggunaan obat sintetis dalam jangka panjang berisiko menyebabkan resistensi, sehingga diperlukan pengembangan alternatif terapi berbasis bahan alami. Senyawa fenilpropanoid rimpang lengkuas (*Alpinia galanga* (L.) Willd.) dilaporkan memiliki potensi sebagai kandidat terapi antikanker dengan target protein *B-Cell Lymphoma 2* (BCL-2) yang berperan dalam menghambat proses apoptosis sel kanker. Penelitian ini menggunakan pendekatan molecular docking yang bertujuan untuk mengevaluasi interaksi senyawa fenilpropanoid rimpang lengkuas (*Alpinia galanga* (L.) Willd.) dengan protein BCL-2 serta menganalisis profil farmakokinetik dan toksisitasnya sebagai kandidat terapi antikanker. Tahapan penelitian meliputi pemodelan dan minimalisasi energi struktur senyawa, penyiapan protein BCL-2, validasi docking, proses docking, visualisasi interaksi, analisis data dan prediksi ADMET. Hasil penelitian menunjukkan bahwa senyawa terbaik dimiliki oleh senyawa *Galanganol C* dengan nilai energi ikatan sebesar -9,4 kcal/mol dan nilai konstanta inhibisi sebesar 0,128 μ M. Senyawa *Galanganol C* membentuk ikatan hidrogen (ASP111) dan ikatan hidrofobik (MET115, ALA149, LEU137) yang memiliki kesamaan dengan ligan alami pada protein BCL-2. Hasil uji *One Sample Wilcoxon Signed Rank Test* menunjukkan bahwa senyawa *Galanganol C* tidak memiliki perbedaan yang signifikan ($p > 0,05$) dengan ligan alami, sehingga nilai afinitasnya dianggap sebanding atau setara secara statistik. Prediksi ADMET menunjukkan senyawa *Galanganol C* memiliki profil ADMET yang cukup baik pada masing-masing parameter. Dengan demikian, dapat disimpulkan bahwa senyawa *Galanganol C* berpotensi dikembangkan lebih lanjut sebagai kandidat terapi antikanker melalui penghambatan protein BCL-2.

Kata kunci: kanker, rimpang lengkuas, fenilpropanoid, BCL-2, molecular docking, ADMET.

MOTTO DAN PERSEMBAHAN

“Allah tidak mengatakan hidup ini mudah. Tetapi Allah berjanji, bahwa sesungguhnya bersama kesulitan ada kemudahan” (QS. Al-Insyirah : 5-6)

“Aku menyukai hidupku, tidak ada penyesalan. Karena semua perasaan yang aku alami, rasa sakit, dan suka cita adalah pengalaman yang membentuk diriku dan hidupku. Aku bangga pada diriku” - Doh Kyungsoo

***“Makan dengan baik, tidur dengan nyenyak, itu yang terbaik”
“Urusan Allah pasti number ONE, urusan hati tetap WE ARE ONE”***

Alhamdulillahilahiobbli’alamin

Kupanjatkan kepada Allah SWT atas segala rahmat dan karunia-Nya yang telah memberikan kekuatan, ketekunan, serta kemudahan dalam segala urusan hingga skripsi ini dapat terselesaikan dengan baik.

Dengan segala kerendahan hati dan segenap rasa syukur, karya ini penulis persembahkan kepada kedua orang tuaku, Bapak Munif dan Ibu Isah Anisah, serta Adikku, Zahra Saniatus Zahwa yang telah memberikan kasih sayang, doa, dan dukungan baik secara moril maupun materi.

Terakhir, untuk Anita Sofiana Putri, pemillik NIM. 42121023 yang di tengah tangis dan ragu tetap bertahan, berjuang, dan melalui semuanya dengan baik. Terima kasih atas segala kerja keras dan semangatnya.

Mari bertahan, lebih baik, lebih bijak dan lebih kuat lagi.

Semoga dengan selesainya skripsi ini, bisa menjadi salah satu kebahagiaan dan setiap langkahku ke depannya dapat menjadi bentuk bakti bagi bapa dan mama. Semoga Allah SWT memberi kesehatan, keberkahan dan kebahagiaan di dunia dan akhirat. Aamiin.

I Love You Munif’s Family

KATA PENGANTAR

Puji syukur kehadirat Allah SWT atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “POTENSI SENYAWA FENILPROPANOID RIMPANG LENGKUAS (*Alpinia galanga* (L.) Willd.) DALAM MENGHAMBAT PROTEIN BCL-2 SEBAGAI TERAPI ANTIKANKER DENGAN PENDEKATAN MOLECULAR DOCKING”. Penyusunan Skripsi ini tidak lepas dari bantuan berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis mengucapkan terima kasih kepada:

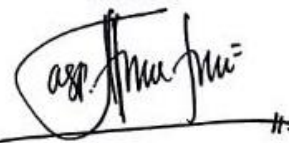
1. Dr. Muh. Kadarisman., S.H.,M.Si selaku Rektor Universitas Peradaban.
2. Rizky Noor Prasetyono, M.Pd selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Peradaban.
3. Syaiful Prayogi, M.Farm selaku Ketua Jurusan Farmasi Universitas Peradaban dan sekaligus Dosen Pembimbing I yang telah membimbing dan memberikan arahan dalam penyusunan skripsi ini.
4. Eka Trisnawati, M.Pd selaku Dosen Pembimbing II yang telah membimbing dan membantu dengan penuh keikhlasan dan kesabaran.
5. apt. Ubun Fadli Serahli, M.Farm selaku Dosen Penguji I yang telah memberikan saran dan masukan bagi penulis.
6. apt. Baedi Mulyanto, S.Farm., M.H. selaku Dosen Penguji II yang telah memberikan tanggapan serta masukan bagi penulis.
7. Luthfi Hidayat Maulana, S.KM., M.Si selaku kepala laboran di Laboratorium Farmasi Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Peradaban yang telah membantu kelancaran selama penelitian berlangsung.

8. Bapa Munif dan Mama Anis, cinta pertamaku dan surgaku. Sosok yang selalu mengusahakan apapun yang diinginkan peneliti, tak pernah lelah mendoakan peneliti dalam setiap sholat, mencintai dan menyayangi tanpa syarat dan batasan. Terima kasih selalu ada menjadi cahaya, rumah dan hidup dalam segala arti.
9. Terima kasih kepada Titin Sulistiowati yang sudah membersamai dikala suka maupun duka. Juga kepada Putri, mba Afaf, Siska, mba Zahra, dan Mahmudah atas dukungan dan semangatnya. Terima kasih pula untuk teman-teman seperjuangan atas kebersamaan, canda tawa, dan kerjasamanya selama studi. Semangat terus chingu~deul, SOLID!

Terlalu banyak orang yang berjasa kepada penulis selama penyusunan skripsi ini hanya rasa terima kasih yang dapat penulis sampaikan serta doa dan harapan semoga Allah SWT melipat gandakan pahala bagi semua. Atas perhatian dan dukungannya penulis menyampaikan terima kasih.

Paguyangan, 13 September 2025

Penulis



ANITA SOFIANA PUTRI
NIM. 42121023

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	ii
PERNYATAAN PENULIS.....	iii
PERSETUJUAN SKRIPSI.....	iv
PENGESAHAN SKRIPSI	v
<i>ABSTRACT</i>	vi
ABSTRAK.....	vii
MOTTO DAN PERSEMBAHAN.....	viii
KATA PENGANTAR	ix
DAFTAR ISI	xi
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR GAMBAR	xiv
DAFTAR LAMPIRAN.....	xv
DAFTAR ISTILAH.....	xvi
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Rumusan Masalah	5
C. Tujuan Penelitian.....	5
D. Manfaat Penelitian.....	6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	7
A. Kajian Pustaka.....	7
B. Kajian Penelitian Relevan	43
C. Kerangka Pikir.....	44
D. Hipotesis.....	45
BAB III METODE PENELITIAN	46
A. Jenis Penelitian.....	46
B. Tempat dan Waktu Penelitian	46
C. Populasi dan Sampel	46
D. Variabel Penelitian.....	47

E. Definisi Operasional.....	47
F. Alat dan Bahan	48
G. Cara Kerja	51
H. Alur Penelitian.....	54
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	55
A. Pemodelan Struktur Senyawa.....	55
B. Preparasi Protein Target	57
C. Validasi Docking	58
D. Hasil Docking Senyawa Uji	63
E. Visualisasi Hasil Docking	68
F. Hasil Analisis Data	72
G. Hasil Analisis <i>Drug-likeness</i> Berdasarkan <i>Lipinski Rule of Five</i>	75
H. Hasil Prediksi Profil Farmakokinetika dan Toksisitas (ADMET).....	78
BAB V PENUTUP	90
A. Kesimpulan.....	90
B. Saran.....	91
DAFTAR PUSTAKA.....	92
LAMPIRAN	104
Lampiran 1. Surat Izin Penelitian.....	104
Lampiran 2. Kartu Akses Laboratorium.....	105
Lampiran 3. Surat Keterangan Penelitian	106
Lampiran 4. Hasil Docking	107
Lampiran 5. Dokumentasi Penelitian	114
Lampiran 6. Biodata Peneliti.....	122
Lampiran 7. Keterangan Bebas Plagiasi	123

DAFTAR TABEL

Tabel 2. 2 Kajian Penelitian Relevan	43
Tabel 3. 1 Definisi Operasional	47
Tabel 3. 2 Ligan Uji.....	49
Tabel 4. 1 Pemodelan Struktur Senyawa Fenilpropanoid Rimpang Lengkuas	55
Tabel 4. 2 Hasil Validasi Docking	60
Tabel 4. 3 Hasil Docking Senyawa Fenilpropanoid Rimpang Lengkuas.....	64
Tabel 4. 4 Ringkasan Interaksi Residu Hasil Docking Senyawa Terbaik	68
Tabel 4. 5 Hasil Uji Normalitas.....	72
Tabel 4. 6 Hasil Uji <i>One Sample Wilcoxon Signed Rank</i>	74
Tabel 4. 7 Hasil Analisis <i>Drug-likeness</i> Berdasarkan <i>Lipinski Rule of Five</i>	75
Tabel 4. 8 Hasil Prediksi Absorpsi	79
Tabel 4. 9 Hasil Prediksi Distribusi.....	81
Tabel 4. 10 Hasil Prediksi Metabolisme.....	84
Tabel 4. 11 Hasil Prediksi Ekskresi	86
Tabel 4. 12 Hasil Prediksi Toksisitas.....	87

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Jalur Apoptosis	13
Gambar 2. 2 Penghambatan Obat Obatoclax, Navitoclax, dan Venetoclax	16
Gambar 2. 3 Tanaman Lengkuas	22
Gambar 2. 4 Senyawa Fenilpropanoid Rimpang Lengkuas	29
Gambar 3. 1 Protein <i>B-Cell Lymphoma 2</i> (BCL-2).....	49
Gambar 4. 1 Struktur Protein BCL-2	58
Gambar 4. 2 Grid Box Site Docking Protein BCL-2	59
Gambar 4. 3 Visualisasi Interaksi Ligan Alami dengan Protein BCL-2	61
Gambar 4. 4 Visualisasi Interaksi Senyawa Uji dengan Protein BCL-2	69

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Surat Izin Penelitian.....	104
Lampiran 2. Kartu Akses Laboratorium.....	105
Lampiran 3. Surat Keterangan Penelitian	106
Lampiran 4. Hasil Docking	107
Lampiran 5. Dokumentasi Penelitian	114
Lampiran 6. Biodata Peneliti.....	122
Lampiran 7. Keterangan Bebas Plagiasi	123

DAFTAR ISTILAH

Apoptosis	Kematian sel secara terprogram dalam tubuh
BCL-2	<i>B-Cell Lymphoma 2</i> , Protein yang berperan dalam menghambat proses apoptosis
<i>Molecular Docking</i>	Metode komputasi dalam memprediksi interaksi ligan dengan reseptor target
Protein Data Bank	Basis data struktur makromolekul biologis
Ligan	Molekul kecil yang berikatan dengan reseptor target
Reseptor	Protein yang berikatan dengan ligan
RMSD	Parameter yang digunakan untuk menilai validitas metode molecular docking
Å (<i>Ångström</i>)	Satuan yang digunakan dalam nilai RMSD untuk mengukur jarak antar atom
Grid box	Ruang yang digunakan untuk ligan dapat berinteraksi dengan protein target
<i>Binding Affinity</i>	Nilai energi ikatan yang dihasilkan dari penambatan antara ligan dan reseptor
ΔG (Delta G)	Ukuran energi yang terlibat dalam penambatan ligan dan reseptor
ACA	Acetoxychavicol cetate
AEA	Acetoxyeugenol acetate
HCA	Hydroxychavicol acetate
ASP	Asam Aspartat
TYR	Tirosin
VAL	Valin
MET	Metionin
ALA	Alanin
LEU	Leusin
PHE	Fenilalanin