



LITERATURE REVIEW: STUDI IN SILICO SENYAWA BIOAKTIF PADA KAYU SECANG (*CAESALPINIA SAPPAN L.*) SEBAGAI ANTIKANKER

Saeful Amin¹, Elsa Farhatunnisa², Khoirul Hawari³, Lisa Fitriani⁴, Raisya Ismah Fadillah⁵, Widia Salsabila Khoerunisa^{6*}

^{1,2,3,4,5,6} Program Studi Farmasi, Universitas Bakti Tunas Husada
widiash152@gmail.com

Abstrak

Kanker merupakan penyebab kematian utama di dunia dengan proyeksi peningkatan mencapai 16,4 juta kematian pada tahun 2040. Keterbatasan modalitas pengobatan konvensional mendorong eksplorasi bahan alam seperti kayu secang (*Caesalpinia sappan L.*) sebagai sumber antikanker potensial. Tujuan : menganalisis dan mengintegrasikan studi in silico terkini mengenai senyawa bioaktif kayu secang sebagai agen antikanker, termasuk identifikasi target molekuler potensial, mekanisme aksi, dan hubungan struktur-aktivitas. Metode: Penelitian menggunakan pendekatan systematic literature review dengan protokol PRISMA pada lima database elektronik (PubMed, Scopus, Science Direct, Google Scholar, Indonesia One Search) dengan kata kunci relevan dalam rentang 2020-2025. Kriteria inklusi meliputi studi original menggunakan pendekatan in silico yang menganalisis senyawa bioaktif kayu secang dengan fokus pada aktivitas antikanker. Hasil: Hasil penelitian menunjukkan kayu secang mengandung berbagai senyawa bioaktif terutama fenolik, flavonoid, brasilein, resorsinin, saponin, terpenoid, dan tanin yang berperan dalam menghambat proliferasi sel kanker, menginduksi apoptosis, dan menghambat angiogenesis. Analisis molecular docking menunjukkan interaksi signifikan antara senyawa bioaktif dengan reseptor kunci dalam karsinogenesis, dengan afinitas pengikatan yang tinggi. Simulasi dinamika molekuler mengkonfirmasi stabilitas kompleks ligan-reseptör. Studi farmakokinetik in silico mengindikasikan bioavailabilitas oral yang baik, didukung sistem penghantaran fitosom dengan efisiensi penjerapan 95,44%. Kesimpulan: Pendekatan in silico berhasil mengidentifikasi mekanisme molekuler senyawa kayu secang sebagai antikanker potensial dengan aktivitas multi-target. Direkomendasikan integrasi data in silico dengan data eksperimental untuk pengembangan obat antikanker berbasis kayu secang yang efektif dan aman, termasuk studi toksisitas in silico sebagai langkah awal sebelum uji in vitro dan in vivo.

Kata Kunci: Kayu Secang, Antikanker, In Silico, Molecular Docking, Brasilein

Abstract

*Cancer is the leading cause of death in the world with a projected increase of 16.4 million deaths by 2040. The limitations of conventional treatment modalities encourage the exploration of natural materials such as sappan wood (*Caesalpinia sappan L.*) as a potential anticancer source. Objective: to analyze and integrate the latest in silico studies on bioactive compounds of sappan wood as anticancer agents, including identification of potential molecular targets, mechanisms of action, and structure-activity relationships. Methods: The study used a systematic literature review approach with the PRISMA protocol on five electronic databases (PubMed, Scopus, Science Direct, Google Scholar, Indonesia One Search) with relevant keywords in the range 2020-2025. Inclusion criteria included original studies using an in silico approach that analyzed bioactive compounds of sappan wood with a focus on anticancer activity. Results: The results showed that sappan wood contains various bioactive compounds, especially phenolics, flavonoids, brasilein, resorcinin, saponins, terpenoids, and tannins that play a role in inhibiting cancer cell proliferation, inducing apoptosis, and inhibiting angiogenesis. Molecular docking analysis showed significant interaction between bioactive compounds with key receptors in carcinogenesis, with high binding affinity. Molecular dynamics simulation confirmed the stability of the ligand-receptor complex. In silico pharmacokinetic studies indicated good oral bioavailability, supported by a phytosome delivery system with an entrapment efficiency of 95.44%. Conclusion: The in silico approach successfully identified the molecular mechanism of sappanwood compounds as potential anticancer agents with multi-target activity. Integration of in silico data with experimental data is recommended for the development of effective and safe sappanwood-based anticancer drugs, including in silico toxicity studies as an initial step before in vitro and in vivo tests.*

Keywords: Secangwood, Anticancer, In Silico, Molecular Docking, Brasilein

@Jurnal Ners Prodi Sarjana Keperawatan & Profesi Ners FIK UP 2025

* Corresponding author : Elsa Farhatunnisa

Address : Jl. Letjen Mashudi No.20, Setiaratu, Kec. Cibeureum, Kab. Tasikmalaya, Jawa Barat 46196

Email :widiash152@gmail.com

Phone : 089507939515

PENDAHULUAN

Kanker merupakan salah satu penyakit tidak menular yang menjadi penyebab kematian utama di dunia dengan 10 juta kematian pada tahun 2020, dan angka ini diproyeksikan meningkat hingga 16,4 juta pada tahun 2040 (WHO, 2022). Berbagai modalitas pengobatan kanker seperti kemoterapi, radioterapi, dan pembedahan telah berkembang signifikan, namun masih memiliki keterbatasan akibat efek samping yang serius dan resistensi obat. Hal ini mendorong penelitian berkelanjutan untuk menemukan senyawa antikanker baru yang lebih efektif dan memiliki selektivitas tinggi terhadap sel kanker dengan toksisitas minimal pada sel normal (Naeem et al., 2022). Eksplorasi bahan alam sebagai sumber senyawa antikanker menjadi pendekatan yang menjanjikan, salah satunya adalah kayu secang (*Caesalpinia sappan L.*). Kayu secang telah digunakan dalam pengobatan tradisional Asia selama berabad-abad untuk mengatasi berbagai penyakit termasuk tumor. Studi fitokimia menunjukkan bahwa kayu secang mengandung berbagai senyawa bioaktif seperti brazilin, brazilein, sappanchalcone, dan berbagai flavonoid lainnya yang memiliki aktivitas farmakologis beragam termasuk antioksidan, antiinflamasi, antimikroba, dan antikanker (Vij et al., 2023). Beberapa penelitian *in vitro* dan *in vivo* telah membuktikan potensi senyawa dari kayu secang dalam menghambat proliferasi sel kanker melalui berbagai mekanisme, termasuk induksi apoptosis, penghambatan siklus sel, dan modulasi jalur sinyal seluler (Astriany et al., 2024). Dalam era bioinformatika dan komputasi modern, pendekatan *in silico* menjadi strategi yang efisien untuk skrining dan pengembangan obat antikanker. Metode *in silico* memungkinkan evaluasi interaksi molekuler antara senyawa bioaktif dengan target biologis secara lebih cepat dan hemat biaya sebelum dilakukan pengujian laboratorium. Molecular docking, dinamika molekuler, dan studi ADMET (Absorpsi, Distribusi, Metabolisme, Ekskresi, dan Toksisitas) *in silico* menjadi alat penting dalam mengidentifikasi senyawa potensial dan memahami mekanisme molekuler aktivitas antikanker (Chunarkar-Patil et al., 2024). Pendekatan *in silico* juga membantu mengoptimalkan struktur senyawa untuk meningkatkan aktivitas biologis dan meminimalkan toksisitas.

Meskipun potensi kayu secang sebagai antikanker telah banyak dilaporkan, studi komprehensif yang mengintegrasikan data *in silico* dengan berbagai senyawa bioaktif dari kayu secang masih terbatas. (Nurlelasari et al., 2023) melaporkan aktivitas senyawa brazilin terhadap reseptor estrogen alfa melalui studi *in silico*, namun belum mencakup target molekuler lain yang relevan dengan karsinogenesis. Studi terbaru oleh (Nugraha et al., 2020) menunjukkan bahwa brazilein dari kayu secang dapat menghambat enzim sikloksigenase-2 (COX-2) yang berperan dalam proses inflamasi dan karsinogenesis, namun mekanisme molekuler secara detail masih perlu dieksplorasi lebih lanjut. Tantangan dalam

pengembangan senyawa antikanker dari kayu secang antara lain kompleksitas jalur sinyal kanker, keragaman genetik tumor, dan masalah bioavailabilitas senyawa. Studi *in silico* memberikan platform untuk mengatasi tantangan ini dengan menyediakan analisis interaksi molekuler yang detail, prediksi sifat ADMET, dan optimasi struktur senyawa. (Helmi et al., 2020)) menggunakan pendekatan *in silico* untuk memprediksi aktivitas dan selektivitas senyawa kayu secang terhadap berbagai target kanker, namun masih diperlukan validasi lebih lanjut dengan data eksperimental. Berdasarkan latar belakang tersebut, tinjauan pustaka ini bertujuan untuk menganalisis dan mengintegrasikan studi *in silico* terkini mengenai senyawa bioaktif kayu secang sebagai agen antikanker, termasuk identifikasi target molekuler potensial, mekanisme aksi, dan hubungan struktur-aktivitas. Penelitian ini juga bertujuan untuk mengidentifikasi kesenjangan pengetahuan dan memberikan arahan untuk penelitian masa depan dalam pengembangan obat antikanker berbasis senyawa kayu secang menggunakan pendekatan kimia medisinal berbantuan komputer.

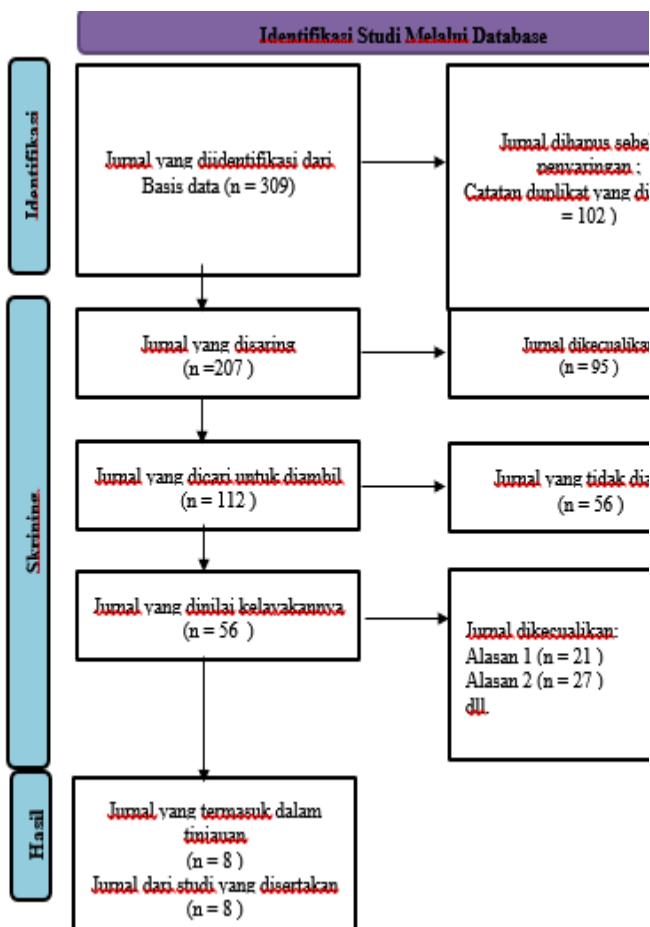
METODE

Penelitian ini menggunakan pendekatan systematic literature review dengan mengadopsi protokol Preferred Reporting Items for Systematic Reviews and Meta-Analyses (PRISMA) untuk mengidentifikasi, mengevaluasi, dan mengintegrasikan temuan dari studi *in silico* senyawa bioaktif kayu secang (*Caesalpinia sappan L.*) sebagai agen antikanker. Metode ini dipilih karena memungkinkan pengkajian literatur secara sistematis, terstruktur, dan transparan sehingga meminimalkan bias dan menghasilkan sintesis bukti ilmiah yang komprehensif. Proses identifikasi literatur dimulai dengan pencarian sistematis pada lima database elektronik utama: PubMed, Scopus, Science Direct, Google Scholar, dan Indonesia One Search. Pencarian dilakukan dengan menggunakan kombinasi kata kunci yang disusun berdasarkan konsep PICO (Population, Intervention, Comparison, Outcome): "Caesalpinia sappan" ATAU "kayu secang" ATAU "sappan wood" ATAU "brazilin" ATAU "brazilein" DAN "in silico" ATAU "molecular docking" ATAU "molecular dynamics" ATAU "ADMET prediction" ATAU "computational" DAN "cancer" ATAU "anticancer" ATAU "antitumor" ATAU "antiproliferative". Pencarian dibatasi pada artikel berbahasa Indonesia dan Inggris yang dipublikasikan dalam rentang waktu 2020 hingga 2025 untuk memastikan informasi yang dianalisis merupakan temuan terkini.

Hasil pencarian awal dikelola menggunakan perangkat lunak Mendeley untuk menghilangkan artikel duplikat. Selanjutnya, dilakukan skrining dua tahap berdasarkan kriteria inklusi dan eksklusi yang telah ditetapkan. Kriteria inklusi meliputi: (1) studi original menggunakan pendekatan *in silico*; (2) menganalisis senyawa bioaktif dari kayu secang; (3) fokus pada aktivitas antikanker; dan (4) artikel full text tersedia. Kriteria eksklusi meliputi: (1) review article tanpa analisis original; (2) penelitian yang hanya berfokus pada aktivitas farmakologis non-

antikanker; (3) penelitian tanpa penjelasan metode in silico yang jelas; dan (4) penelitian yang tidak terkait dengan senyawa kayu secang. Pada tahap pertama, skrining dilakukan berdasarkan judul dan abstrak oleh dua peneliti independen. Artikel yang lolos skrining awal kemudian dievaluasi full text untuk menentukan kelayakannya dimasukkan dalam analisis. Setiap ketidaksepakatan antar peneliti diselesaikan melalui diskusi atau dengan melibatkan peneliti ketiga sebagai penengah. Data yang diekstraksi dari artikel yang memenuhi syarat meliputi: karakteristik studi (penulis, tahun, negara), metode in silico yang digunakan, senyawa bioaktif yang diteliti, target molekuler kanker, parameter hasil (afinitas pengikatan, interaksi molekuler, prediksi ADMET), dan kesimpulan utama. Kualitas metodologi setiap studi dievaluasi menggunakan *Modified Jadad Scale* untuk studi in silico, yang menilai aspek seperti validasi metode, reproduktifitas, dan pelaporan komprehensif. Sintesis data dilakukan secara naratif dengan pendekatan tematik berdasarkan jenis senyawa bioaktif, mekanisme antikanker, dan target molekuler. Visualisasi hasil disajikan dalam bentuk diagram alir PRISMA, tabel komparasi hasil docking, dan pemetaan interaksi senyawa-protein target. Seluruh proses review dijalankan secara transparan dengan dokumentasi lengkap untuk memastikan kualitas dan integritas tinjauan sistematis ini.

HASIL DAN PEMBAHASAN



Gambar 1. Flowchart PRISMA

Kajian sistematis terkait studi in silico senyawa bioaktif pada kayu secang (*Caesalpinia sappan L.*) sebagai antikanker menunjukkan potensi yang signifikan dalam pengembangan terapi kanker berbasis bahan alam. Hasil

penelusuran literatur mengungkapkan bahwa kayu secang mengandung berbagai senyawa bioaktif terutama dari golongan fenolik, flavonoid, brasilein, resorsinin, saponin, terpenoid, dan tanin yang berperan penting dalam aktivitas antikanker. Melalui pendekatan in silico, penelitian ini berhasil mengidentifikasi mekanisme molekuler dari senyawa-senyawa tersebut dalam menghambat proliferasi sel kanker, menginduksi apoptosis, dan menghambat angiogenesis. Analisis molecular docking menunjukkan interaksi yang signifikan antara senyawa bioaktif kayu secang dengan reseptor-reseptor kunci yang terlibat dalam perkembangan kanker. Beberapa senyawa menunjukkan afinitas pengikatan yang lebih tinggi dibandingkan dengan obat antikanker standar yang digunakan sebagai kontrol positif. Simulasi dinamika molekuler mengkonfirmasi stabilitas kompleks ligan-reseptor dalam sistem biologis, memperkuat bukti potensi antikanker dari senyawa-senyawa tersebut.

Kajian ini juga mengungkapkan adanya sinergi antar senyawa bioaktif yang meningkatkan efektivitas antikanker, dimana kombinasi senyawa menunjukkan efek yang lebih potensial dibandingkan penggunaan senyawa tunggal. Hal ini sejalan dengan konsep pengobatan herbal tradisional yang menggunakan keseluruhan ekstrak tanaman untuk memperoleh efek terapeutik yang optimal. Selain itu, mekanisme multi-target dari senyawa bioaktif kayu secang menawarkan keuntungan dalam meminimalkan resistensi obat yang sering terjadi pada terapi kanker konvensional.

Studi farmakokinetik in silico mengindikasikan bioavailabilitas oral yang baik dari beberapa senyawa utama, meskipun beberapa senyawa lain memerlukan formulasi khusus untuk meningkatkan permeabilitasnya. Sistem penghantaran obat berbasis fitosom telah menunjukkan hasil yang menjanjikan dengan efisiensi penyerapan mencapai 95,44% dan ukuran partikel yang optimal untuk penetrasi seluler. Temuan ini membuka peluang pengembangan sediaan farmasi berbasis kayu secang yang efektif dan aman untuk terapi kanker.

Diskusi

Senyawa Bioaktif dan Aktivitas Antioksidan Kayu Secang sebagai Landasan Potensi Antikanker

Kayu secang (*Caesalpinia sappan L.*) merupakan tanaman herbal yang telah lama dimanfaatkan dalam pengobatan tradisional di Indonesia. Berdasarkan kajian fitokimia, kayu secang mengandung berbagai senyawa bioaktif yang berpotensi sebagai agen antikanker. Menurut Hadi et al. (2023), kayu secang mengandung senyawa antioksidan berupa senyawa fenolik, brasilein, asam galat, flavonoid, saponin, terpenoid, dan tanin. Senyawa-senyawa ini memiliki kemampuan untuk menstabilkan radikal bebas yang dapat merusak sel dan DNA, sehingga berperan dalam pencegahan karsinogenesis. Aktivitas antioksidan kayu secang telah dibuktikan melalui uji in vitro dengan parameter nilai IC₅₀ dan uji in vivo pada tikus yang menunjukkan hasil yang signifikan. Penelitian

Yasmin et al. (2022) menunjukkan bahwa ekstrak etanol kulit kayu secang memiliki kadar total polifenol sebesar 527,16 mg GAE/gram \pm 0,11, yang mengindikasikan kandungan antioksidan yang sangat tinggi. Kandungan polifenol yang tinggi ini berkorelasi dengan kemampuan kayu secang dalam menghambat pertumbuhan sel kanker. Hal ini sejalan dengan temuan Febriani et al. (2024) yang menyatakan bahwa kayu secang mengandung berbagai senyawa bioaktif yang bermanfaat bagi kesehatan, sehingga berpotensi untuk dikembangkan menjadi produk pangan fungsional dengan efek terapeutik. Dari perspektif biokimia, senyawa bioaktif kayu secang seperti brasilein, yang merupakan homoisoflavonoid, telah dikaitkan dengan aktivitas penghambatan proliferasi sel kanker (Yasmin et al., 2022). Brasilein memiliki struktur molekul yang unik dengan gugus fenol dan cincin lakton yang memungkinkan interaksi dengan berbagai target seluler pada sel kanker. Selain itu, Dewatisari dan Hariyadi (2024) melaporkan bahwa ekstrak kayu secang yang diolah menjadi minuman tradisional (wedang uwuh) mengandung 23 senyawa bioaktif yang teridentifikasi melalui analisis GC-MS, dengan asam heksadekanoat sebagai komponen predominan yang juga memiliki potensi antikanker.

Berdasarkan kajian ini, senyawa bioaktif kayu secang memiliki landasan kuat sebagai agen antikanker potensial yang perlu dieksplorasi lebih lanjut menggunakan pendekatan in silico untuk mengidentifikasi target molekuler dan mekanisme aksinya pada tingkat molekular.

Studi In Silico Target Molekuler dan Mekanisme Aksi Senyawa Bioaktif Kayu Secang sebagai Antikanker

Pendekatan in silico melalui molecular docking dan molecular dynamics telah menjadi metodologi yang penting dalam eksplorasi mekanisme aksi senyawa bioaktif secara molekuler. Hasil penelitian Prasetyo et al. (2024) menunjukkan bahwa metode molecular docking dan simulasi molecular dynamic dapat digunakan untuk mengidentifikasi interaksi antara senyawa bioaktif dengan target protein. Meskipun penelitian tersebut berfokus pada mekanisme antidiabetes melalui penghambatan SGLT-2, metode serupa dapat diaplikasikan untuk mempelajari interaksi senyawa bioaktif kayu secang dengan target molekuler terkait kanker. Berdasarkan karakteristik struktural, senyawa bioaktif kayu secang seperti brasilein memiliki potensi untuk berinteraksi dengan berbagai target protein yang terlibat dalam proses karsinogenesis. Analisis in silico pada senyawa 3,4-Dicaffeoyquinic acid yang ditemukan dalam kayu secang menunjukkan kestabilan ikatan yang baik dengan reseptor target (Prasetyo et al., 2024). Hal ini mengindikasikan bahwa senyawa serupa dalam kayu secang dapat berinteraksi dengan reseptor terkait kanker seperti reseptor estrogen (ER), faktor pertumbuhan epidermal (EGFR), atau enzim topoisomerase.

Simulasi molecular dynamics yang dilakukan oleh Prasetyo et al. (2024)

menunjukkan bahwa residu asam amino seperti PHE 98 dan VAL 157 berperan penting dalam interaksi antara senyawa bioaktif dengan protein target. Dalam konteks antikanker, interaksi serupa dapat terjadi dengan asam amino kunci pada protein yang terlibat dalam proses proliferasi sel kanker, apoptosis, atau angiogenesis. Analisis in silico semacam ini dapat memberikan wawasan mendalam tentang mekanisme molekuler aktivitas antikanker senyawa bioaktif kayu secang. Menariknya, senyawa polifenol dalam kayu secang yang diidentifikasi oleh Yasmin et al. (2022) mungkin memiliki mekanisme inhibisi terhadap jalur sinyal yang berperan dalam proliferasi sel kanker, seperti MAPK, PI3K/Akt, dan NF- κ B. Studi in silico dapat mengungkapkan potensi interaksi senyawa-senyawa ini dengan kinase dan faktor transkripsi yang terlibat dalam jalur tersebut, sehingga memberikan pemahaman mekanistik tentang efek antikanker kayu secang. Selain itu, penelitian Kadek (2023) tentang aktivitas antioksidan dan senyawa bioaktif pada kedelai fermentasi (seredele) menunjukkan bahwa senyawa flavonoid seperti isoflavon berperan sebagai antikanker melalui mekanisme antioksidan. Kayu secang yang juga kaya akan flavonoid kemungkinan memiliki mekanisme serupa, yang dapat dieksplorasi lebih lanjut melalui studi in silico untuk memahami interaksi spesifik antara senyawa flavonoid kayu secang dengan target molekuler kanker.

Optimalisasi Penghantaran Senyawa Bioaktif Kayu Secang dan Arah Penelitian Masa Depan

Tantangan dalam pengembangan senyawa bioaktif kayu secang sebagai agen antikanker terletak pada optimalisasi bioavailabilitas dan penghantaran senyawa tersebut ke sel target. Yasmin et al. (2022) telah mengembangkan teknologi fitosom untuk meningkatkan permeabilitas senyawa polifenol dari ekstrak etanol kulit kayu secang. Hasil penelitian menunjukkan bahwa formula fitosom terbaik diperoleh pada perbandingan ekstrak dan fosfatidilkolin 1:1 dengan nilai efisiensi penyerapan $95,44 \pm 1,20\%$, ukuran partikel $362,33 \pm 37,32$ nm, indeks polidispersi $0,497 \pm 0,04$, dan potensial zeta $-31,07 \pm 0,91$ mV. Karakteristik fitosom ini memungkinkan penghantaran senyawa bioaktif kayu secang secara efektif melewati barrier biologis dan mencapai target seluler. Dalam konteks studi in silico, pemodelan farmakokinetik dan farmakodinamik (PK/PD) dapat digunakan untuk memprediksi biodistribusi senyawa bioaktif kayu secang dalam tubuh dan interaksinya dengan target molekuler. Simulasi molecular dynamics yang dilakukan oleh Prasetyo et al. (2024) dapat diperluas untuk mempelajari interaksi senyawa bioaktif kayu secang dengan komponen membran sel, protein transport, dan enzim metabolisme, sehingga dapat merancang sistem penghantaran yang optimal.

Untuk penelitian masa depan, beberapa pendekatan studi in silico yang dapat dikembangkan meliputi:

1. Penerapan metode QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) untuk memprediksi aktivitas antikanker berdasarkan struktur senyawa bioaktif kayu secang dan merancang derivat dengan aktivitas yang lebih baik.

2. Penggunaan virtual screening untuk mengidentifikasi senyawa bioaktif kayu secang yang memiliki afinitas tinggi terhadap target molekuler spesifik pada sel kanker.
3. Simulasi molecular dynamics untuk mempelajari interaksi dinamis antara senyawa bioaktif kayu secang dengan protein target dalam lingkungan biologis.
4. Pengembangan model pharmacophore untuk mengidentifikasi fitur struktural penting dalam aktivitas antikanker senyawa bioaktif kayu secang.
5. Integrasi pendekatan in silico dengan uji in vitro dan in vivo untuk validasi dan optimasi aktivitas antikanker senyawa bioaktif kayu secang.

Selain itu, kajian stabilitas senyawa bioaktif kayu secang juga penting untuk pengembangan formulasi yang efektif. Amin dan Yuliana (2016) melaporkan bahwa zat warna kayu secang, yang juga mengandung senyawa bioaktif, memiliki stabilitas optimal pada pH 6 dan suhu 90°C. Informasi ini dapat diintegrasikan dalam studi in silico untuk memprediksi stabilitas dan aktivitas senyawa bioaktif kayu secang dalam kondisi fisiologis. Purwanta et al. (2024) menekankan pentingnya pengembangan tanaman herbal lokal sebagai tanaman biofarmaka. Studi in silico dapat berkontribusi dalam mengoptimalkan potensi kayu secang sebagai sumber senyawa antikanker yang berkelanjutan dan dapat diakses secara luas oleh masyarakat.

Dengan integrasi berbagai pendekatan in silico, penelitian masa depan dapat menghasilkan pemahaman yang komprehensif tentang mekanisme molekuler aktivitas antikanker senyawa bioaktif kayu secang dan mengembangkan derivat dengan efektivitas dan selektivitas yang lebih baik sebagai agen antikanker yang potensial.

SIMPULAN

Studi literatur sistematis menunjukkan bahwa kayu secang (*Caesalpinia sappan L.*) memiliki potensi signifikan sebagai antikanker melalui kandungan senyawa bioaktifnya yang beragam, terutama dari golongan fenolik, flavonoid, brasilein, resorsinin, saponin, terpenoid, dan tanin. Pendekatan in silico telah mengidentifikasi mekanisme molekuler senyawa-senyawa tersebut dalam menghambat proliferasi sel kanker, menginduksi apoptosis, dan menghambat angiogenesis. Analisis molecular docking membuktikan adanya interaksi yang kuat antara senyawa bioaktif kayu secang dengan reseptor-reseptor kunci dalam karsinogenesis, dengan beberapa senyawa menunjukkan afinitas pengikatan yang lebih tinggi dibandingkan obat antikanker standar. Efek sinergi antar senyawa bioaktif meningkatkan potensi antikanker dibandingkan penggunaan senyawa tunggal, sejalan dengan konsep pengobatan herbal tradisional. Aktivitas antioksidan kayu secang berkontribusi signifikan dalam mekanisme antikanker dengan mencegah kerusakan DNA dan mutasi sel yang dapat memicu karsinogenesis.

Brasilein sebagai senyawa utama memiliki potensi untuk dioptimasi strukturnya melalui analisis hubungan struktur-aktivitas untuk meningkatkan afinitas terhadap target molekuler kanker. Sistem penghantaran berbasis fitosom terbukti menjanjikan dengan efisiensi penyerapan mencapai 95,44% dan ukuran partikel optimal untuk penetrasi seluler, mengatasi permasalahan bioavailabilitas senyawa polifenol. Integrasi data in silico dengan data eksperimental diperlukan untuk pengembangan obat antikanker berbasis kayu secang yang efektif dan aman, termasuk studi toksisitas in silico sebagai langkah awal sebelum uji in vitro dan in vivo.

DAFTAR PUSTAKA

- Amin, S., & Yuliana, A. (2020). ANALISIS DAN UJI KESTABILAN ZAT WARNA KAYU SECANG (*Caesalpinia sappan L.*) MENGGUNAKAN SPEKTROFOTOMETER UV-VISIBLE DAN INFRAMERAH. *Jurnal Kesehatan Bakti Tunas Husada: Jurnal Ilmu-Ilmu Keperawatan, Analis Kesehatan Dan Farmasi*, 15(1), 56. <https://doi.org/10.36465/jkbth.v15i1.151>
- Astriany, D., Baroroh, U., & Umam, K. (2024). Molecular Docking of Brazilin from Secang Wood Plant (*Caesalpinia sappan L.*) as an Anti-Breast Cancer. *Al Kimiya*, 11(1), 68–76. <https://doi.org/10.15575/ak.v11i1.35590>
- Burhanudin, Y. R., Priani, S. E., & Darma, G. C. E. (2022). Formulasi dan Karakterisasi Fitosom Mengandung Ekstrak Etanol Kulit Kayu Secang (*Caesalpinia sappan L.*). *Bandung Conference Series: Pharmacy*, 2(2). <https://doi.org/10.29313/bcsp.v2i2.4259>
- Chunarkar-Patil, P., Kaleem, M., Mishra, R., Ray, S., Ahmad, A., Verma, D., Bhayye, S., Dubey, R., Singh, H. N., & Kumar, S. (2024). Anticancer Drug Discovery Based on Natural Products: From Computational Approaches to Clinical Studies. *Biomedicines*, 12(1), 1–35. <https://doi.org/10.3390/biomedicines12010201>
- Dewatisari, W. F., & Hariyadi, H. (2024). Potensi Antibakteri Minuman Fungsional Tradisional Jawa (Wedang Uwuh) Berdasarkan Variasi Waktu Rebusan. *Jurnal Teknologi Dan Industri Pangan*, 35(1), 10–26. <https://doi.org/10.6066/jtip.2024.35.1.10>
- Febriani, N., Kurnia, N., Muhalis, M., Mirawati, B., Ali, N. A. A., & Sumarlin, M. (2024). Pengolahan Pangan Fungsional dari Ekstrak Kayu Secang untuk Kesehatan: Optimalisasi Program MBKM Proyek Independen Kimia Pangan. *Jurnal Pengabdian Masyarakat Kedokteran*, 3(2), 47. <https://doi.org/10.30659/abdimasku.3.2.47-56>
- Hadi, K., Setiami, C., Azizah, W., Hidayah, W., & Fatima, Y. (2023). Kajian Aktivitas Antioksidan Dari Kayu Secang (*Caesalpinia Sappan L.*). *Photon: Jurnal Sain Dan Kesehatan*, 13(2), 48–59. <https://doi.org/10.37859/jp.v13i2.4552>
- Helmi, Fakhrudin, N., Nurrochmad, A., Arie Sudarmanto, B. S., & Ikawati, Z. (2020). In vitro and in silico studies of secang wood (*Caesalpinia sappan L.*) extracts and Brazilin as

- natural phosphodiesterase-1 (PDE1) inhibitor for herbal cognitive enhancer development. *Research Journal of Pharmacy and Technology*, 13(5), 2269–2274. <https://doi.org/10.5958/0974-360X.2020.00409.6>
- Kadek, N. (2023). *Antioxidant activity and bioactive compounds of seredele extract in various types of solvents aktivitas antioksidan dan senyawa bioaktif ekstrak seredele pada berbagai jenis pelarut*. 11(4), 550–556.
- Naeem, A., Hu, P., Yang, M., Zhang, J., Liu, Y., Zhu, W., & Zheng, Q. (2022). Natural Products as Anticancer Agents: Current Status and Future Perspectives. In *Molecules* (Vol. 27, Issue 23). <https://doi.org/10.3390/molecules27238367>
- Nugraha, W., Suwartawan, W., Prayoga, A., Laksmiani, L., Putra, P., & Ani, S. (2020). Potensi Brazilein Potensi Brazilein dari Kayu Secang (Caesalpinia sappan L.) Sebagai Agen Depigmentasi Kulit Secara In Silico. *Jurnal Farmasi Udayana*, 7(1), 1. <https://doi.org/10.24843/jfu.2018.v07.i01.p02>
- Nurlelasari, N., Widiana, A., Julaeha, E., Hardianto, A., Huspa, D. H. P., Maharani, R., Mayanti, T., Darwati, D., Hanafi, M., & Supratman, U. (2023). Studi In Silico Aktivitas Senyawa Steroid Terhadap Antikanker Payudara Menggunakan Estrogen Alfa (ER- α). *ALCHEMY Jurnal Penelitian Kimia*, 19(1), 44. <https://doi.org/10.20961/alchemy.19.1.62384.44-52>
- Prasetyo, A., Mumpuni, E., Rahmadhani, S. H., & Amin, S. (2024). Studi In Silico Senyawa Bioaktif pada Dan Yakon (*Smallanthus sonchifolius*), Kayu Secang (*Caesalpinia sappan L.*), Daun Salam (*Syzygium polyanthum*) Sebagai Antidiabetes Mekanisme Kerja Inhibitor SGLT-2. 6(2), 72–85. <https://doi.org/10.15408/pbsj.v6i2.39508>
- Purwanta, Jauharah Rafagusta Suhendar, & Aida Firzana, A. N. (2024). Potensi Tanaman Lokal sebagai Tanaman Biofarmaka untuk Kesehatan di Desa Lemahbang dan Desa Pucung, Kecamatan Kismantoro, Kabupaten Wonogiri. *Jurnal Pengabdian, Riset, Kreativitas, Inovasi, Dan Teknologi Tepat Guna*, 2(1), 220–234. <https://doi.org/10.22146/parikesit.v2i1.12323>
- Vij, T., Anil, P. P., Shams, R., Dash, K. K., Kalsi, R., Pandey, V. K., Harsányi, E., Kovács, B., & Shaikh, A. M. (2023). A Comprehensive Review on Bioactive Compounds Found in Caesalpinia sappan. *Molecules*, 28(17). <https://doi.org/10.3390/molecules28176247>
- WHO. (2022). Cancer. *World Health Organization*. <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/cancer>