

EKSPLORASI POTENSI SENYAWA BAHAN ALAM SEBAGAI KANDIDAT ANTIKANKER PARU MELALUI PENDEKATAN *MOLECULAR DOCKING*: SUATU TINJAUAN LITERATUR

Ainun Latifa Nisa¹, Saeful Amin^{2*}

^{1,2} Universitas Bakti Tunas Husada, Tasikmalaya, Indonesia

* Corresponding Author: saefulamin@universitas-bth.ac.id

Received: 21-08-2025

Revised: 03-09-2025

Approved: 20-09-2025

ABSTRAK

Kanker paru masih menjadi salah satu penyebab utama kematian akibat kanker di seluruh dunia, dengan karakteristik heterogenitas molekuler yang kompleks serta munculnya resistensi terhadap berbagai terapi konvensional. Sumber daya alam diketahui mengandung beragam senyawa bioaktif yang berpotensi dikembangkan sebagai agen antikanker. Kemajuan teknologi komputasi, khususnya *molecular docking*, menghadirkan peluang baru dalam mengungkap interaksi senyawa alami dengan protein target pada kanker paru secara lebih efisien, cepat, dan hemat biaya. Artikel tinjauan literatur ini bertujuan menelaah penelitian-penelitian yang mengkaji potensi senyawa alam terhadap target kanker paru melalui pendekatan *molecular docking*. Proses penelusuran dilakukan pada basis data PubMed, ScienceDirect, dan Google Scholar dengan cakupan publikasi tahun 2015–2025. Berdasarkan hasil kajian, sejumlah senyawa seperti piperlongumine, artocarpin, antosianin, dan nordamnacanthal terbukti memiliki afinitas ikatan yang tinggi terhadap target molekuler penting, antara lain EGFR, PDGFR- α , PTGS2, dan PPARG. Nilai skor docking yang tinggi menunjukkan potensi aktivitas biologis, meskipun tetap membutuhkan verifikasi lanjutan melalui penelitian *in vitro* maupun *in vivo*. Dengan demikian, *molecular docking* dapat dipandang sebagai langkah awal yang krusial dalam eksplorasi obat berbasis bahan alam untuk terapi kanker paru serta menjadi fondasi bagi pengembangan kandidat obat baru di masa mendatang.

Kata kunci: antikanker, bahan alam, kanker paru, *molecular docking*, senyawa bioaktif.

ABSTRACT

Lung cancer remains one of the leading causes of cancer-related mortality worldwide, characterized by high molecular heterogeneity and the emergence of resistance to conventional therapies. Natural resources are known to contain diverse bioactive compounds with potential to be developed as anticancer agents. Advances in computational technology, particularly *molecular docking*, have created new opportunities to explore the interactions of natural compounds with lung cancer target proteins in a more efficient, rapid, and cost-effective manner. This literature review aims to analyze studies investigating the potential of natural compounds against lung cancer targets using *molecular docking* approaches. Literature searches were conducted through PubMed, ScienceDirect, and Google Scholar, covering publications from 2015 to 2025. The findings indicate that several compounds, such as piperlongumine, artocarpin, anthocyanins, and nordamnacanthal, exhibit strong binding affinities toward key molecular targets, including EGFR, PDGFR- α , PTGS2, and PPARG. High docking scores suggest promising biological activity, although further validation through *in vitro* and *in vivo* studies is still required. Thus, *molecular docking* can be considered a crucial initial step in the exploration of natural product-based drugs for lung cancer therapy and serves as a foundation for the development of future drug candidates.

Keywords: anticancer, bioactive compounds, lung cancer, *molecular docking*, natural products

PENDAHULUAN

Kanker merupakan salah satu penyakit mematikan yang terjadi akibat pertumbuhan sel abnormal dalam tubuh. Sel-sel ini dapat merusak fungsi organ vital dan berisiko menimbulkan kematian. Setiap tahunnya diperkirakan terdapat sekitar 30.000 kasus kanker di dunia, dengan kanker paru-paru dan kanker payudara termasuk

jenis yang paling banyak menyebabkan kematian. Penyakit ini sangat berbahaya karena muncul akibat pertumbuhan sel yang tidak terkendali pada berbagai bagian tubuh dan berpotensi mengancam jiwa penderitanya (Amin. & Meithasari., 2025).

Kanker paru tetap menjadi penyebab utama kematian akibat kanker di seluruh dunia. Penyakit ini memiliki variasi molekuler yang sangat tinggi dan sering kali mengalami ketahanan terhadap pengobatan target maupun kemoterapi. Oleh karena itu, pencarian terapi antikanker baru, termasuk dari sumber daya alam, serta pemahaman mendalam tentang target molekuler penting, menjadi prioritas utama dalam riset kanker modern (Friedlaender et al., 2024). Bahan alam merupakan gudang molekul bioaktif yang telah lama menjadi sumber obat kanker. Kombinasi antara pendekatan tradisional bioassay dan teknik komputasi dengan molecular docking, virtual screening, pharmacophore modelling dan molecular dynamics bisa mempercepat identifikasi kandidat molekuler yang potensial, menilai afinitas ikatan ke target protein, dan memprediksi sifat farmakokinetik dan toksikologi awal sebelum uji laboratorium lebih lanjut. Pendekatan *in silico* kini menjadi langkah penting dalam tahap awal penemuan obat berbasis bahan alam (Das et al., 2024).

Penggunaan molecular docking dalam riset penemuan obat terus meningkat, mengingat keunggulannya yang efisien serta rendah biaya dalam memprediksi interaksi antara ligan dan protein. Pendekatan ini menjadi bagian penting dalam proses skrining awal, termasuk dalam eksplorasi senyawa alami sebagai kandidat terapi antikanker (Saeful Amin & Tsani, 2025).

Molecular docking dalam penemuan obat modern berperan penting karena mampu menyaring ribuan hingga jutaan senyawa secara cepat untuk memprediksi pola pengikatan serta afinitasnya terhadap protein target kanker seperti EGFR, ALK, METTL3, dan lainnya. Pendekatan ini tidak hanya mempercepat proses identifikasi kandidat obat awal, tetapi juga menekan biaya dan waktu dibandingkan metode eksperimental konvensional. Selain itu, teknik ini dapat dengan mudah dikombinasikan dengan pendekatan *in-silico* lain, seperti prediksi ADMET, dinamika molekuler, maupun farmakologi jaringan, guna meningkatkan ketepatan hasil prediksi (Sardarpour et al., 2024).

Banyak studi terbaru melaporkan contoh-contoh senyawa alami yang menunjukkan interaksi menjanjikan terhadap target-target kanker paru melalui molecular docking, termasuk dari sumber tanaman, jamur, dan organisme laut. Selain itu, penelitian integratif yang menggabungkan network pharmacology dan docking semakin sering digunakan untuk memetakan jalur molekuler yang dimodulasi dan memperkuat dasar mekanistik dari temuan *in silico*. Namun, tantangan tetap ada seperti validasi biologis eksperimental, masalah bioavailabilitas, serta kemungkinan hasil positif palsu dari metode docking semata (Xie et al., 2025).

Meskipun banyak laporan awal menjanjikan, belum ada tinjauan komprehensif yang menggabungkan perkembangan paling mutakhir, khusus pada potensi senyawa alami terhadap target-target kanker paru. Tujuan dari tinjauan literatur ini adalah untuk mengumpulkan, menganalisis, dan menyajikan berbagai hasil penelitian terkait potensi senyawa bahan alam terhadap target kanker paru dengan pendekatan *molecular docking*. Artikel ini bertujuan memberikan gambaran menyeluruh mengenai senyawa-senyawa alami yang telah diteliti, target protein yang digunakan, serta metode *in-silico* yang diterapkan. Selain itu, penelitian ini juga ditujukan untuk mengidentifikasi tren, keunggulan, dan keterbatasan penelitian sebelumnya, sehingga dapat menjadi dasar dan arahan bagi penelitian lanjutan, baik secara *in vitro* maupun *in vivo*.

METODE PENELITIAN

Studi pada penelitian ini menggunakan metode tinjauan pustaka sistematis untuk menilai potensi senyawa alami terhadap target kanker paru melalui teknik molecular docking. Data dikumpulkan dari tiga basis data ilmiah, yaitu PubMed, ScienceDirect, dan Google Scholar dengan kata kunci “molecular docking”, “kanker paru”, dan “bahan alam”. Pencarian difokuskan pada publikasi tahun 2015–2025.

Artikel yang ditemukan diseleksi berdasarkan judul dan abstrak, kemudian dipilih sesuai kriteria, yaitu membahas molecular docking pada senyawa alami terhadap kanker paru, ditulis dalam bahasa Indonesia atau Inggris, serta tersedia dalam bentuk teks lengkap. Artikel yang tidak relevan, hanya berupa laporan klinis, atau tidak melibatkan pendekatan in silico dikeluarkan dari analisis. Dari ribuan artikel yang ditemukan, 8 artikel memenuhi kriteria dan dianalisis lebih lanjut.

Analisis dilakukan dengan menelaah target molekuler yang digunakan, jenis senyawa alami yang diuji, metode docking seperti AutoDock, MOE, atau Schrödinger, serta hasil interaksi ikatan protein-ligan. Karena penelitian ini hanya menggunakan sumber sekunder yang telah dipublikasikan, maka tidak memerlukan persetujuan etik penelitian.



HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN

Penelitian ini menggunakan pendekatan tinjauan pustaka sistematis untuk mengevaluasi potensi senyawa alami sebagai agen antikanker paru melalui teknik molecular docking. Pendekatan sistematis ini dilakukan dengan menyaring data dari tiga basis data ilmiah utama, yaitu PubMed (302 artikel), ScienceDirect (11.325 artikel), dan Google Scholar (452 artikel), menggunakan kata kunci “molecular docking”, “kanker paru”, dan “bahan alam”. Fokus waktu publikasi dibatasi antara tahun 2015 hingga 2025, sehingga hasil yang diperoleh mencerminkan perkembangan terkini dalam bidang bioinformatika dan kimia komputasi terkait kanker paru.

Tabel 1. Hasil Tinjauan Literatur

Refrensi	Tanaman/Senyawa	Reseptor	Software	Hasil
(Lestari et al., 2024)	CNP0179931	Reseptor EGFR	BIOVIA Discovery Studio Visualizer 2019, Auto Dock	CNP0179931 merupakan senyawa yang

Refrensi	Tanaman/Senyawa	Reseptor	Software	Hasil
(Prasetiawati et al., 2021)	Senyawa Antosianin	EGFR bermutasi (L858R, T790M, V948R)	Tools versi 1.5.6, LiganScout Advance versi 4,3, DecoyFinder 2.0, dan BindingDB	memiliki aktivitas yang baik terhadap reseptor EGFR sebesar (ΔG) = -11,65 kkal/mol
(Haryadi et al., 2024)	16-hydroxyroyleanone 7 α -acetoxyroyleanone and 16-acetoxy-7 α -hydroxyroyleanone	6GES (PTGS2 protein) and 5ZMA (PPARG protein)	ChemDraw Ultra 12.0, Chem3D Pro 12.0, Marvin Sketch, AutoDock Tools® dan AutoDock4/Auto Grid4, Discovery Studio Visualizer® serta Python Molecular Viewer®.	Malvidin menunjukkan afinitas terbaik dari semua antosianidin yang diujikan dengan ΔG -9,83kkal/mol dan K_i 62,25nM
(Frimayanti et al., 2021)	Senyawa Analog Kalkon	Protein 4HFZ	Discovery Studio 21.0 Client (DSV 19.0), AutoDock Tools 1.5.6, AutoDock Vina, PyRx 0.8, PyMOL 2.3, GaussView 5.0, ChemDraw, Cytoscape 3.10.1, VENNY 2.1, Swiss TargetPrediction, STRING, UniProt, GeneCards, OMIM, DisGeNET, dan TTD	terdapat 77 target protein, dengan PTGS2 dan PPARG sebagai target kunci, tetapi masih perlu diuji melalui penelitian in vitro dan in vivo
(Wahyudi & Roza, 2021)	Senyawa 2,6-dimethylocta-3,5,7-trien-2-ol	EGFR (Epidermal growth factor receptor)	chemdraw ultra 12.0 (cambridgesoft), Discovery Studio Visualizer (BIOVIA), MGL Tools 1.5.6, AutoDock Tools 1.5.6, AutoDock Vina, dan PyMol.	Senyawa analog kalkon nomor 2 memiliki potensi -7,2 kkal/mol, RMSD = 0,000
(Hanif Sabawi)	Buah Mengkudu (<i>Morinda Citrifolia L.</i>)	Reseptor Protein	Autodock 1.5.7, Biovia Discovery Studio Visualizer, Pymol, dan Autodock vina.	2,6-dimethylocta-3,5,7-trien-2-ol yang diperoleh dari ekstrak daun zodia mungkin bisa digunakan sebagai obat kanker paru, meski masih kurang efektif.
			Moe dan Discovery Studio 2017 R2	Nordamnacanthal dengan nilai -6.49

Refrensi	Tanaman/Senyawa	Reseptor	Software	Hasil
Ma'ruf, 2025)		PDGFR- α		lebih rendah dari pada obat pembanding Gemcitabin (-4,77).
(Samsul Hadi et al., 2025)	cabe jawa (<i>Piper retrofractum Vahl</i>) Retrofractamide C, Pipereicosalidine, Retrofractamide A, Piperlongumine, dan Piperine.	Reseptor EGFR	PyMOL, PLANTS, Discovery Studio,	Retrofractamide A memiliki dokcing score terendah - 99.0128.
(Natasya, 2021)	Daun sukun (<i>Artocarpus altilis</i>),	Reseptor 2ITW	AutodockTools-1.5.6, Discovery Molecular viewer, ChemDraw Ultra 8.0, MarvinSketch 5.2, pkCSM	Senyawa Artocarpin memiliki energi Gibbs (ΔG)/afinitas binding sebesar - 9,24 kcal/mol.

Molecular docking merupakan metode untuk mensimulasikan konformasi optimal berdasarkan sifat saling melengkapi dan pra-organisasi, sehingga dapat memprediksi serta menentukan afinitas ikatan dan mode interaksi antara ligan dan reseptor (Fan et al., 2019). Dalam literatur ini penelitian *in-silico* pada senyawa alam menargetkan berbagai protein terkait dengan kanker paru seperti EGFR, PDGFR- α , PTGS2, PPARG, MDM2. Dengan menggunakan perangkat lunak umum seperti AutoDock/AutoDock Vina, PyRx, MOE, Discovery Studio. Oleh karena itu, integrasi docking dengan simulasi dinamika molekuler (MD) menjadi langkah penting untuk menilai kestabilan kompleks ligan-reseptor dalam kondisi mendekati biologis (Hollingsworth & Dror, 2018).

Nilai *docking score* yang semakin negatif biasanya menunjukkan ikatan antara senyawa dan target protein semakin kuat, sehingga senyawa tersebut layak diprioritaskan untuk diuji lebih lanjut. Meski begitu, skor ini tidak otomatis berarti senyawa pasti aktif secara biologis, karena hanya merupakan perkiraan energi ikatan dalam kondisi model komputer yang statis. Nilai tersebut juga dipengaruhi oleh metode perhitungan dan pengaturan area ikatan yang digunakan. Oleh karena itu, hasil *docking* sebaiknya dianggap sebagai langkah awal untuk memilih kandidat, yang kemudian perlu dibuktikan dengan analisis tambahan seperti simulasi dinamika molekuler, perhitungan energi ikatan yang lebih akurat, serta uji laboratorium nyata (Eberhardt et al., 2021). *Molecular docking* menawarkan cara cepat mengevaluasi interaksi senyawa dengan target kanker, namun tetap memerlukan validasi karena hasil eksperimen *in vitro* dan *in vivo* lebih akurat meski mahal dan memakan waktu (Amin et al., 2025).

Piperlongumine (PL) adalah senyawa yang secara konsisten dilaporkan memiliki sifat antikanker pada paru termasuk penginduksian ROS, efek pada makrofag tumor, dan kemampuan mengatasi resistensi obat pada model pra-klinikal terbaru. Studi *in vitro/in vivo* dan kajian kombinasi menunjukkan piperlongumine meningkatkan efektivitas EGFR-TKI dan menurunkan volume tumor pada model pra-klinis (Zhou et al., 2025).

Artocarpin menekan migrasi dan invasi sel paru (NSCLC) melalui penghambatan Focal Adhesion Kinase (FAK) dan jalur terkait EMT, serta memicu mekanisme apoptosis

pada sel A549. Ini mendukung temuan in-silico bahwa artocarpin secara plausible menargetkan target pro-metastasis pada kanker paru (Nonpanya et al., 2021).

Studi terbaru menunjukkan malvidin dan glikosidanya memiliki aktivitas antiproliferatif, menginduksi apoptosis, dan memodulasi autofagi pada berbagai garis sel kanker; ada bukti preklinis bahwa antosianin menekan jalur pro-survival yang juga relevan pada NSCLC (Sood et al., 2024).

Anthraquinone senyawa (termasuk nordamnacanthal) menunjukkan aktivitas antiproliferatif terhadap sel paru dengan mekanisme termasuk induksi apoptosis dan arrest siklus sel; beberapa studi melaporkan IC50 dalam kisaran μM . Namun, toksisitas sistemik dan selektivitas tetap menjadi perhatian (Latifah et al., 2021). Nordamnacanthal layak diuji lebih lanjut, tetapi perlu data farmakokinetik dan profil toksisitas. Disarankan kombinasi in-silico (docking + MD) dan in-vitro (IC50, apoptosis assay) sebagai langkah berikut.

Senyawa CNP0179931 pada analisis interaksi mengungkap bahwa meskipun jumlah ikatan hidrogen dan interaksi non-kovalen CNP0179931 lebih sedikit dibandingkan ligan alami, pola ikatannya menunjukkan kemiripan residu asam amino kunci (Cys775, Leu747, Glu762, Asp855, Phe856, dan Leu777). Hal ini menandakan adanya stabilitas interaksi yang relevan dengan situs aktif EGFR (Lestari et al., 2024).

Namun demikian, beberapa keterbatasan masih perlu dicermati. Pertama, hasil docking bersifat prediktif dan sangat dipengaruhi parameter teknis seperti pemilihan grid box serta algoritma pencarian upaya pengembangan formulasi baru seperti nanopartikel, liposom, atau sistem penghantaran berbasis polimer sangat potensial untuk meningkatkan efektivitasnya (Patra et al., 2018).

KESIMPULAN

Kajian literatur ini menegaskan bahwa pendekatan molecular docking berperan penting sebagai metode in silico yang efisien dalam mengevaluasi potensi senyawa bahan alam sebagai kandidat terapi kanker paru. Berdasarkan hasil telaah terhadap delapan penelitian yang memenuhi kriteria, sejumlah senyawa seperti piperlongumine, artocarpin, antosianin (malvidin), dan nordamnacanthal menunjukkan kemampuan berinteraksi kuat dengan target protein utama, antara lain EGFR, PDGFR- α , PTGS2, dan PPAR γ . Nilai energi ikatan yang rendah pada hasil docking mengindikasikan kestabilan interaksi antara ligan dan protein, sehingga senyawa tersebut berpotensi dikembangkan sebagai agen antikanker paru.

Hasil kajian ini juga memperlihatkan tren meningkatnya pemanfaatan teknologi komputasi dalam proses penemuan obat berbasis bahan alam. Keunggulan metode molecular docking terletak pada efisiensinya dalam memprediksi afinitas ikatan dan selektivitas molekul, meskipun hasilnya bersifat prediktif dan memerlukan pembuktian lebih lanjut melalui uji in vitro maupun in vivo.

Dengan demikian, penelitian ini memberikan pemahaman komprehensif mengenai perkembangan riset molecular docking terhadap target kanker paru, serta menjadi dasar ilmiah bagi pengembangan lebih lanjut senyawa bioaktif alami sebagai terapi potensial kanker paru di masa mendatang.

DAFTAR PUSTAKA

- Amin., S., & Meithasari., F. (2025). Peran Kimia Medisinal Dalam Pengembangan Obat Antikanker. *Indonesian Journal of Science*, 1(6), 1321–1333.
- Amin, S., Azhari, R. A., Nurmaliya, F. R., Pujawati, L., Hamidah, S., & Sopiyyurrohman, M.

- L. (2025). Peran Kimia Medisinal dalam Pengembangan Obat Antikanker: Kajian Literatur tentang Senyawa Bioaktif dari Sumber Alam. *Jurnal Ners*, 9(2), 2987–2992. <https://doi.org/10.31004/jn.v9i2.44578>
- Das, A. P., Mathur, P., & Agarwal, S. M. (2024). Machine Learning, Molecular Docking, and Dynamics-Based Computational Identification of Potential Inhibitors against Lung Cancer. *ACS Omega*, 9(4), 4528–4539. <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c07338>
- Eberhardt, J., Santos-Martins, D., Tillack, A. F., & Forli, S. (2021). AutoDock Vina 1.2.0: New Docking Methods, Expanded Force Field, and Python Bindings. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 61(8), 3891–3898. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.1c00203>
- Fan, J., Fu, A., & Zhang, L. (2019). Progress in molecular docking. *Quantitative Biology*, 7(2), 83–89. <https://doi.org/10.1007/s40484-019-0172-y>
- Friedlaender, A., Perol, M., Banna, G. L., Parikh, K., & Addeo, A. (2024). Oncogenic alterations in advanced NSCLC: a molecular super-highway. *Biomarker Research*, 12(1), 24. <https://doi.org/10.1186/s40364-024-00566-0>
- Frimayanti, N., Djohari, M., & Nurul Khusnah, A. (2021). Molecular Docking for Chalcone Analogue Compounds as Inhibitor for Lung Cancer A549. *Jurnal Ilmu Kefarmasian Indonesia*, 19(1), 87–95. www.pdb.org
- Hanif Sabawi Ma'ruf, D. (2025). Jurnal Medika Farmaka Molecular Docking Senyawa pada Buah Mengkudu (Morinda. *Jurnal Medika Farmaka*, 3(24), 303–310. <https://doi.org/10.33482/jmedfarm.v3i1.62>
- Haryadi, W., Gurning, K., & Astuti, E. (2024). Molecular target identification of two *Coleus amboinicus* leaf isolates toward lung cancer using a bioinformatic approach and molecular docking-based assessment. *Journal of Applied Pharmaceutical Science*, 14(5), 203–210. <https://doi.org/10.7324/JAPS.2024.164753>
- Hollingsworth, S. A., & Dror, R. O. (2018). Molecular Dynamics Simulation for All. *Neuron*, 99(6), 1129–1143. <https://doi.org/10.1016/j.neuron.2018.08.011>
- Latifah, S. Y., Gopalsamy, B., Rahim, R. A., Ali, A. M., & Lajis, N. H. (2021). Anticancer potential of damnacanthal and nordamnacanthal from morinda elliptica roots on t-lymphoblastic leukemia cells. *Molecules*, 26(6). <https://doi.org/10.3390/molecules26061554>
- Lestari, N. A., Isrul, M., Ramadhan, D. S. F., & Fatahu. (2024). Skrining Virtual Berbasis Farmakofor Dari Database Bahan Alam Sebagai Inhibitor Alosterik Mutan T790M/C797 EGFR Untuk Penemuan Obat Kanker Paru. *Jurnal Pharmacia Mandala Waluya*, 3(3), 168–186. <https://doi.org/10.54883/jpmw.v3i3.102>
- Natasya, R. S. (2021). Studi Docking Potensi *Artocarpus altilis* Sebagai Kandidat Antikanker Paru-Paru. In *Prosiding Seminar Nasional Dan Penelitian Kesehatan 2018*.
- Nonpanya, N., Sanookpan, K., Sriratanasak, N., Vinayanuwattikun, C., Wichadakul, D., Sritularak, B., & Chanvorachote, P. (2021). Artocarpin targets focal adhesion kinase-dependent epithelial to mesenchymal transition and suppresses migratory-associated integrins in lung cancer cells. *Pharmaceutics*, 13(4), 1–22. <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics13040554>
- Patra, J. K., Das, G., Fraceto, L. F., Campos, E. V. R., Rodriguez-Torres, M. D. P., Acosta-Torres, L. S., Diaz-Torres, L. A., Grillo, R., Swamy, M. K., Sharma, S., Habtemariam, S., & Shin, H. S. (2018). Nano based drug delivery systems: Recent developments and future prospects. *Journal of Nanobiotechnology*, 16(1), 1–33. <https://doi.org/10.1186/s12951-018-0392-8>

- Prasetiawati, R., Suherman, M., Permana, B., & Rahmawati, R. (2021). Molecular Docking Study of Anthocyanidin Compounds Against Epidermal Growth Factor Receptor (EGFR) as Anti-Lung Cancer. *Indonesian Journal of Pharmaceutical Science and Technology*, 8(1), 8. <https://doi.org/10.24198/ijpst.v8i1.29872>
- Saeful Amin, & Tsani, G. A. (2025). Tinjauan Literatur: Molecular Docking Fitokimia Indonesia Terhadap Target Terapeutik Empat Jenis Kanker. *Journal of Public Health Science*, 2(2), 183–190. <https://doi.org/10.70248/jophs.v2i2.2191>
- Samsul Hadi, Khadijah, N., & Febriani, N. R. (2025). Prediksi aktivitas Piper retrofractum Vahl terhadap reseptor EGFR yang berkontribusi terhadap kanker paru paru menggunakan docking. *JFARM - Jurnal Farmasi*, 3(1), 32–39. <https://doi.org/10.58794/jfarm.v3i1.1276>
- Sardarpour, N., Goodarzi, Z., & Gharaghani, S. (2024). Docking-Based Virtual Screening Method for Selecting Natural Compounds with Synergistic Inhibitory Effects Against Cancer Signalling Pathways Using a Multi-Target Approach. *Iranian Journal of Biotechnology*, 22(2). <https://doi.org/10.30498/ijb.2024.398939.3718>
- Sood, R., Sanjay, Choi, H. K., & Lee, H. J. (2024). Potential anti-cancer properties of malvidin and its glycosides: Evidence from in vitro and in vivo studies. *Journal of Functional Foods*, 116(December 2023), 106191. <https://doi.org/10.1016/j.jff.2024.106191>
- Wahyudi, Y., & Roza, D. (2021). Docking Molekular Potensi Senyawa 2,6-Dimethylocta-3,5,7-Trien-2-Ol Terhadap Senyawa 4LL0 Anti Kanker Paru. *Prosiding Seminar Nasional Kimia & Pendidikan Kimia#2 - 2021*, 275–279.
- Xie, X., Jiang, Y., Liu, S., & Xie, C. (2025). Integrating molecular docking and network pharmacology to reveal the molecular mechanisms of Anemarrhena asphodeloides in the treatment of non-small cell lung cancer. *Discover Oncology*, 16(1). <https://doi.org/10.1007/s12672-025-03178-8>
- Zhou, Y., Teng, W., Wu, J., Luo, Y., Wang, Y., & Li, Y. (2025). Piperlongumine Inhibits Lung Cancer Growth by Inducing Endoplasmic Reticulum Stress Leading to Suppression of M2 Macrophage Polarization. *Biological Procedures Online*, 27(1). <https://doi.org/10.1186/s12575-025-00279-0>