

Analisis *In-Silico* Potensi Senyawa Antioksidan Batang *Spatholobus littoralis* (Bajakah)

*Nia Asri Setyawan, Amelinda Endaryani¹, Eliana Sakadina, Agus Muji Santoso

Program Studi Pendidikan Biologi Universitas Nusantara PGRI Kediri

*Penulis Korespondensi : asrinia519@gmail.com

ABSTRACT

Bajakah is a traditional medicinal plant native to the forests of Kalimantan and is known to contain various active compounds such as flavonoids, hydroquinone, alkaloids, phenols, and terpenoids. This study aims to analyze the antioxidant potential of compounds found in the stem of Spatholobus littoralis through in silico methods, including drug-likeness evaluation based on Lipinski's Rule, ADMET prediction (absorption, distribution, metabolism, excretion, and toxicity), and toxicity assessment using ProTox-3.0.

The results showed that all five compounds complied with Lipinski's Rule and exhibited high gastrointestinal absorption and reasonably good bioavailability. These compounds also demonstrated diverse antioxidant activities, such as free radical scavenging and inhibition of oxidative enzymes. Based on toxicity predictions, flavonoids and terpenoids were classified as Class V (non-toxic), alkaloids as Class IV (slightly toxic), and hydroquinone and phenols as Class III (moderately toxic), with hydroquinone showing the highest toxicity indicated by an LD₅₀ value of 225 mg/kg. These findings support the potential of bajakah stem as a promising source of natural antioxidant compounds for further development.

Key words:

Bajakah, *Spatholobus littoralis*, antioksidan, in silico, ADMET, Lipinski, toksisitas

Riwayat artikel

Diterima: 16/11/2025

Diperbaiki:-

Terbit:8/5/2026

PENDAHULUAN

Bajakah (*Spatholobus littoralis*) masuk kedalam Famili *Fabaceae* dari Genus *Uncaria* dan tergolong dalam Suku *Phaseoleae*, pertama kali ditemukan pada tahun 1842 oleh Justus Karl Hasskarl, seorang cendekiawan botani asal Jerman (Ninkaew & Chantaranonthai, 2014). Tanaman ini mengandung metabolit primer dan sekunder, di mana metabolit primer merupakan senyawa esensial yang dihasilkan melalui reaksi dan jalur vital demi keberlangsungan hidup organisme, seperti glikolisis, siklus TCA (tricarboxylic acid), atau jalur shikimat (Pott et al., 2019). Sebaliknya, metabolit sekunder bersifat nonesensial namun berperan penting dalam pertumbuhan vegetatif dan adaptasi, seperti simbiosis, pertahanan, transportasi, serta perlindungan terhadap patogen (Thirumurugan et al., 2018; Wink, 2010:2). Tanaman ini unik karena hanya tumbuh di daerah tertentu, seperti hutan rawa gambut Kalimantan Tengah, dengan kondisi iklim mikro khas suhu sekitar 31°C, kelembaban udara 75%, dan intensitas cahaya rendah sekitar 20% (Oliver et al.,

2022). Selain Kalimantan, bajakah juga ditemukan tumbuh liar di Bangka Belitung, menunjukkan adaptasinya pada habitat hutan tropis yang lembab. Riset terbaru terhadap batang bajakah asal Bangka Belitung menunjukkan bahwa ekstrak etanolnya mengandung senyawa aktif seperti fenol hidrokuinon/tanin, flavonoid, dan alkaloid senyawa yang diketahui memiliki kemampuan sebagai antioksidan dan antikanker.

Bajakah memiliki potensi yang cukup luas sebagai tanaman sumber antioksidan dan telah digunakan secara turun-temurun oleh masyarakat suku Dayak di Kalimantan sebagai obat tradisional untuk penyembuhan penyakit seperti diare, pegal linu, luka, hingga dipercaya mampu mengobati kanker (Nastati, 2022). Penelitian Kalalinggi dkk., (2024), masyarakat Kalimantan memanfaatkan air rebusan batang bajakah sebagai obat tradisional untuk mengatasi sakit perut, dan disentri dilakukan dengan cara meminum air hasil rebusan batang bajakah tersebut. Penelitian Selpi dkk. (2024) juga mengungkap tanaman bajakah juga diketahui memiliki khasiat untuk membantu mengobati diabetes. Cara penggunaannya dilakukan dengan memotong bagian akar, kemudian air yang keluar dari akar tersebut diminum secara langsung. Penelitian ini sejalan dengan Suciati dkk. (2024) akar bajakah bisa untuk menyembuhkan tumor, benjolan, dan gangguan pada kelenjar getah bening dengan cara merebus akar kemudian meminum air rebusannya.

Penelitian secara laboratorium juga mengungkapkan potensi bajakah secara medik pengujian fitokimia yang dilakukan oleh Maulina et al. (2019) menunjukkan hasil bahwa alkaloid, flavonoid, dan terpenoid adalah senyawa yang terkandung dalam bajakah. Ekstrak etanol kayu bajakah mempunyai daya antioksidan sangat kuat yaitu IC₅₀ sebesar 8,25 µg/ml (Iskandar & Warsidah, 2020). Batang bajakah yang mengandung senyawa fenolik dan flavonoid menunjukkan aktivitas antioksidan yang kuat dan aman digunakan. Hal tersebut diperjelas oleh Zhang et al. (2015) yang menyatakan bahwa terdapat Lebih dari 200 kandungan metabolit sekunder yang dimiliki oleh tanaman bergenus *Uncaria* dengan dominasi Alkaloid, terpenoid, serta flavonoid yang jumlahnya mendominasi. Flavonoid terdapat hampir di seluruh bagian tanaman termasuk akar, batang, kayu, dan kulit. Senyawa ini mampu menghambat ekspresi isoform sintase oksidan, nitrat, siklooksigenase, dan lipooksigenase, yang bertanggung jawab keluarnya mediator inflamasi. Seperti histamin, bradikinin, serotonin, leukotrien, dan prostaglandin (Corwin, 2009). Senyawa ini bagi manusia berpotensi sebagai antioksidan, antibakteri, antiinflamasi, dan antialergi (Natasa et al., 2021). Mekanisme munculnya efek antioksidan pada senyawa ini berasal dari gugus hidroksil flavonoid yaitu donor atom hidrogen yang melakukan penangkapan terhadap radikal bebas (Neldawati et al., 2013).

Penemuan ini memperkuat validasi ilmiah terhadap pengetahuan lokal serta membuka peluang pemanfaatan tanaman bajakah sebagai bahan obat herbal alami yang tumbuh dari kekayaan hayati wilayah Indonesia. Penelitian batang bajakah menjadi penting karena masyarakat mencari alternatif dari obat kimia yang berpotensi menimbulkan efek samping, mulai dari gangguan pencernaan, kerusakan organ vital seperti hati dan ginjal, hingga resistensi dan ketergantungan. Situasi ini mendorong pencarian metode pengobatan alternatif yang lebih aman, alami, dan minim resiko kesehatan. Batang bajakah yang telah digunakan secara tradisional mengandung senyawa seperti fenolik, flavonoid, steroid, alkaloid, dan hidrokuinon yang memiliki aktivitas antioksidan kuat dan aman. Potensi ini memberikan alternatif signifikan terhadap obat antioksidan kimia komersial, baik golongan steroid (AIS) maupun non-steroid (AINS). Tujuan penelitian ini adalah untuk menganalisis secara *in silico* potensi senyawa

antioksidan yang terkandung dalam batang tanaman Bajakah (*Spatholobus littoralis*). Analisis ini akan fokus pada identifikasi dan karakterisasi metabolit sekunder yang diduga kuat memiliki aktivitas antioksidan, guna memberikan dasar ilmiah bagi pemanfaatan Bajakah sebagai agen terapi alami.

METODE

Penelitian ini akan menggunakan metode deskriptif eksploratif untuk menganalisis potensi senyawa antioksidan pada batang Bajakah (*Spatholobus littoralis*) secara *in silico*. Pendekatan deskriptif eksploratif ini bertujuan untuk mendapatkan data yang mendefinisikan dan menjelaskan konsep serta pola yang relevan dengan aktivitas antioksidan senyawa dalam bajakah.

1. Alat dan Bahan

Penelitian ini menggunakan HP Samsung Galaxy A05s sebagai perangkat keras utama. Spesifikasi perangkat ini meliputi prosesor Qualcomm Snapdragon 680, RAM 6 GB, dan GPU Adreno 610, yang beroperasi pada sistem Android 14 dengan antarmuka One UI 6.0. Pencarian studi literatur dilakukan secara daring melalui Website Google Scholar (<https://scholar.google.com/>)

2. Prosedur

2.1 Penyiapan Canonical SMILES

Melalui kajian pustaka ditemukan 10 senyawa aktif yang berpotensi sebagai obat. Namun hanya 5 senyawa yang dapat dianalisis secara lanjut dikarenakan lima senyawa yang tidak didapatkan didatabase canonical SMILE <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>. Kelima senyawa tersebut adalah flavonoid, hidrokuinon, alkaloid, fenol dan terpenoid. Senyawa fenol, hidrokuinon, flavonoid, dan alkaloid diketahui memiliki aktivitas sebagai antioksidan dan antikanker (Rahmawati et al., 2023). Senyawa steroid berperan sebagai agen anti inflamasi serta menyeimbangkan hormon, sehingga berpotensi untuk pengobatan peradangan dan gangguan hormonal. Sementara itu, senyawa terpenoid diketahui memiliki efek antimikroba, antikanker, dan anti radang (Sari et al., 2021). Data canonical SMILES masing-masing senyawa diperoleh dari website PubChem.

2.2. Analisis Molekul Sifat Kemiripan Obat

Analisis kemiripan obat (drug likeness) dilakukan menggunakan situs SwissADME <http://www.swissadme.ch/> dengan mengacu pada aturan Lipinski. Aturan ini menyatakan bahwa suatu senyawa berpotensi memiliki aktivitas seperti obat jika memenuhi beberapa kriteria, yaitu berat molekul kurang dari 500 Dalton, nilai logP dibawah 5, jumlah donor ikatan hidrogen kurang dari 5, dan jumlah akseptor ikatan hidrogen kurang dari 10. Prinsip ini banyak digunakan dalam proses penemuan dan pengembangan obat untuk mengetahui sifat farmakologis suatu senyawa (Lipinski, 2000).

2.3. Analisis ADMET

Prediksi sifat fisikokimia dan farmakokinetik (ADMET) dari kelima senyawa dilakukan menggunakan situs SwissADME dan pkCSM. Parameter ADMET yang dianalisis meliputi absorpsi berdasarkan tingkat penyerapan di saluran cerna (HIA), distribusi dilihat dari kemampuan

menembus sawar darah otak (BBB) dan volume distribusi (VDss), metabolisme melalui interaksi dengan enzim sitokrom P450 (CYP1A2, CYP2C19, CYP2C9, CYP3A4), serta ekskresi yang diukur dari laju total clearancs (Shofi,2021)

2.4.Uji Toksisitas

Penentuan indikator toksisitas akan dilakukan melalui analisis potensi toksisitas oral akut. Prediksi awal potensi ini akan diperoleh dari platform daring AdmetSAR (<http://lmmd.ecust.edu.cn/admetSar1/home/>). Setelah itu, nilai LD50 dan kelas toksisitas akan ditetapkan menggunakan website ProTox-3.0 (<https://tox.charite.de/protox3/>).

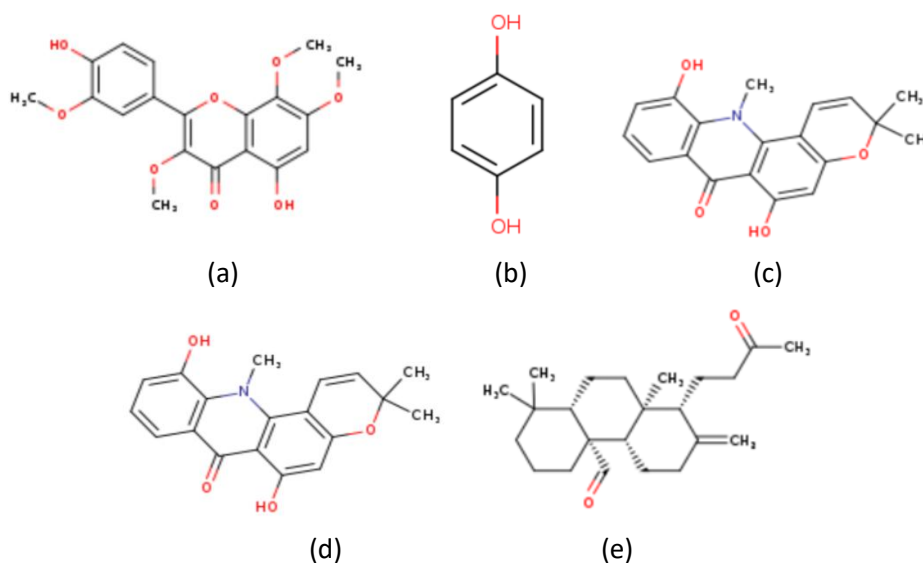
HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil analisis 5 senyawa antioksidan yaitu Fenol, Hidrokuinon, Terpenoid, Alkaloid, dan Flavonoid menunjukkan bahwa senyawa-senyawa tersebut memiliki potensi kemiripan sebagai obat, sesuai dengan parameter yang ditetapkan dalam aturan Lipinski melalui website SwissADME.

Tabel 1. Aktivitas Senyawa pada Bajakah (*Spatholobus littoralis*) sebagai Antioksidan

Senyawa	Pa>0,7	Aktifitas
Flavonoid, dari 65 hanya 10 yang berkaitan dengan antioksidan	0,802	Free radical scavenger
	0,722	Antioxidant
	0,783	Lipid peroxidase inhibitor
	0,882	NADPH oxidase inhibitor
	0,919	Peroxidase inhibitor
	0,823	HMOX1 expression enhancer
	0,703	Chemopreventive
	0,725	Antineoplastic
	0,82	Vasoprotector
	0,713	Antiinflammatory
Hidrokuinon, dari 336 hanya 15 saja yang berkaitan dengan antioksidan	0,921	Glutathione thiolesterase
	0,838	P-benzoquinone reductase
	0,928	Ubiquinol-cytochrome-c
	0,899	Glucose oxidase inhibitor
	0,883	Monodehydroascorbate
	0,888	APOA1 expression enhancer

	0,826	Gluconate 2-dehydrogenase
	0,85	Nitrate reductase
	0,825	Pterin deaminase inhibitor
	0,824	Crotonoyl-[acyl-carrier-protein] hydratase inhibitor
	0,826	Nucleoside oxidase (H ₂ O ₂ -forming) inhibitor
	0,826	Protein-disulfide reductase
	0,822	Manganese peroxidase
	0,824	Phosphatidylserine
	0,823	Laccase inhibitor
Alkaloid, dari 4 hanya 3 yang berkaitan dengan antioksidan	0,843	membrane integrity agonist
	0,847	CYP2C12 substrate
	0,828	antineoplastic
Fenol, dari 297 hanya 8 saja yang berkaitan dengan antioksidan	0,918	NADPH Peroxidase Inhibitor
	0,883	Peroxidase Inhibitor
	0,88	Monodehydroascorbate reductase (NADH) inhibitor
	0,879	Thioredoxin inhibitor
	0,839	Manganese peroxidase inhibitor
	0,839	Protein-disulfide reductase (glutathione)
	0,849	Mucomembranous protector
	0,838	N-hydroxyarylamine O-acetyltransferase inhibitor
Terpenoid, dari 10 senyawa hanya 2 yang berkaitan dengan antioksidan	0,914	Antineoplastic
	0,772	Hepatoprotectant



Gambar 1. a) Struktur senyawa flavonoid, b)

Tabel 2. Aturan Lipinski terhadap senyawa aktif tanaman Bajakah (*Spatholobus littoralis*)

Senyawa	Aturan Lipinski					Kesimpulan
	Berat Molekul <500 dalton	Donor Obligasi H <5	Aseptor ikatan H <10	Aseptor ikatan H <10	Kelarutan dalam air	
Flavonoid	374.34 g/mol	2	8	3.41	Cukup larut	Memenuhi
Hidrokinon	110.11 g/mol	2	2	0.92	Sangat mudah larut	Memenuhi
Alkaloid	323.34 g/mol	2	4	2.82	Cukup larut	Memenuhi
Fenol	94.11 g/mol	1	1	1.24	Sangat mudah larut	Memenuhi
Terpenoid	344.53 g/mol	0	2	3.55	Cukup larut	Memenuhi

Hasil dari 5 senyawa aktif yang terdapat dalam tanaman Bajakah (*Spatholobus littoralis*) menunjukkan bahwa semuanya memenuhi Aturan Lipinski sebagai kriteria kelayakan yang digunakan sebagai obat. Seluruh senyawa memiliki massa molekul kurang dari 500 g/mol, jumlah donor ikatan hidrogen kurang dari 5, serta akseptor ikatan hidrogen kurang dari 10. Selain itu, nilai log P dari semua senyawa juga berada di bawah batas maksimum yaitu 5, yang menunjukkan profil kelarutan dan permeabilitas yang baik (Nusantoro, Y. R., & Fadlan, A., 2020). Kelarutan dalam air dari senyawa-senyawa tersebut bervariasi, mulai dari sangat mudah larut hingga cukup larut, namun secara keseluruhan masih dalam kategori yang dapat diterima (Halim, 2013). Oleh karena itu, senyawa flavonoid, hidrokinon, alkaloid, fenol, dan terpenoid dari tanaman Bajakah

semuanya dinyatakan memenuhi kriteria Lipinski, yang berarti memiliki potensi tinggi untuk dikembangkan lebih lanjut sebagai kandidat obat alami (Coimbra et al., 2021).

Hasil prediksi ADMET terhadap lima senyawa yaitu Flavonoid, Hidrokuinon, Alkaloid, Fenol, dan Terpenoid menunjukkan bahwa seluruh senyawa memiliki kemampuan absorpsi gastrointestinal (GI absorption) yang tinggi. Hal ini menunjukkan bahwa kelima senyawa ini memiliki potensi untuk diserap dengan baik di saluran pencernaan, yang merupakan tahap awal penting dalam meningkatkan bioavailabilitas senyawa aktif dalam tubuh (Vélez et al., 2022). Untuk parameter BBB permeant, yang menunjukkan kemampuan senyawa melintasi sawar darah otak (blood-brain barrier), diketahui bahwa Hidrokuinon, Alkaloid, dan Fenol memiliki kemampuan untuk menembus sawar tersebut, sedangkan Flavonoid dan Terpenoid tidak. Hal ini penting dalam mempertimbangkan efek terapeutik pada sistem saraf pusat. Senyawa yang mampu melewati BBB berpotensi menimbulkan efek biologis di otak, namun juga harus diperhatikan potensi neurotoksisitasnya (Pires et al., 2015).

Tabel 3. Hasil Prediksi ADMET

Senyawa	Gi Absorption	BBB Permeant	Pgp substrate	CYP Inhibitor					Bioavailability score
				1A2	2C19	2C9	2D6	3A4	
Flavonoid	High	No	No	Yes	No	Yes	No	Yes	0.55
Hidrokunion	High	Yes	No	No	No	No	No	Yes	0.55
Alkaloid	High	Yes	No	Yes	No	Yes	Yes	No	0.55
Fenol	High	Yes	No	Yes	No	No	No	No	0.55
Terpenoid	High	Yes	No	No	Yes	Yes	Yes	No	0.55

Keterangan: BBB permeant = saraf sawar otak; CYP inhibitor = penghambat enzim sitokrom P450

Berdasarkan parameter P-glycoprotein (Pgp) substrate, seluruh senyawa terprediksi bukan substrat P-gp, yang merupakan protein transpor efluks utama yang berperan dalam mengeluarkan senyawa dari dalam sel, termasuk di saluran usus dan sawar darah otak. Ketidakterlibatan kelima senyawa sebagai substrat P-gp mengindikasikan bahwa mereka tidak mudah dipompa keluar dari sel, sehingga berpotensi meningkatkan konsentrasi intraseluler dan efektivitas terapeutiknya (Blake et al., 2005). Prediksi terhadap kemampuan senyawa menghambat enzim sitokrom P450 (CYP), yang berperan penting dalam metabolisme obat, menunjukkan bahwa sebagian besar senyawa tidak menunjukkan aktivitas penghambatan terhadap isoform CYP. Namun, Flavonoid terdeteksi menghambat isoform CYP1A2 dan CYP2C9, sementara Terpenoid menghambat CYP1A2, CYP2C9, dan CYP3A4. Aktivitas inhibisi ini perlu diperhatikan karena dapat menimbulkan potensi interaksi obat dan menghambat metabolisme senyawa lain dalam tubuh (Song et al., 2021; Kim et al., 2015). Sebaliknya, Hidrokuinon, Alkaloid, dan Fenol tidak menunjukkan efek inhibisi terhadap enzim CYP manapun, sehingga relatif lebih aman dari potensi interaksi metabolik.

Nilai bioavailability score untuk kelima senyawa adalah 0.55, yang merupakan nilai sedang dan menunjukkan adanya kemungkinan senyawa untuk tersedia dalam sirkulasi sistemik setelah pemberian oral. Meskipun tidak tergolong sangat tinggi, nilai ini masih cukup

menjanjikan untuk pengembangan senyawa sebagai kandidat obat oral. Secara keseluruhan, kelima senyawa menunjukkan profil ADMET yang cukup baik. Tingginya GI absorption, tidak adanya peran sebagai substrat P-gp, dan rendahnya potensi inhibisi CYP (untuk sebagian senyawa) merupakan indikator positif dalam pengembangan senyawa ini sebagai kandidat farmakologis. Namun, potensi inhibisi CYP oleh Flavonoid dan Terpenoid tetap perlu diperhatikan dalam studi lanjutan terkait interaksi obat (Chen et al., 2023).

Hasil prediksi toksisitas pada Tabel 4 melalui ProTox-3.0 menunjukkan bahwa dari lima senyawa yang diuji, dua senyawa yaitu flavonoid dan terpenoid termasuk dalam kelas V dengan nilai LD50 sebesar 5000 mg/kg. Menurut sistem klasifikasi GHS (Globally Harmonized System), senyawa dengan nilai LD50 lebih dari 2000 mg/kg termasuk dalam kategori tidak beracun atau berisiko rendah (OECD, 2001). Kelas V menunjukkan tingkat toksisitas yang rendah dan mengindikasikan bahwa senyawa tersebut relatif tidak berbahaya jika tertelan dalam jumlah tertentu (OECD, 2001). Hal ini menunjukkan bahwa kedua senyawa tersebut memiliki tingkat toksisitas yang sangat rendah dan relative aman jika dikonsumsi. Sebaliknya, senyawa hidrokuinon dan fenol menunjukkan nilai LD50 masing-masing sebesar 225 mg/kg dan 270 mg/kg serta tergolong dalam kelas toksisitas III. Kelas ini menunjukkan senyawa berpotensi berbahaya karena nilai LD50-nya berada di antara 50 hingga 300 mg/kg (EPA, 2012). Menurut Malmfors dan Teiling (1983), nilai LD50 atau lethal dose 50% merupakan indikator toksikologi penting yang menunjukkan jumlah zat yang dibutuhkan untuk menyebabkan kematian pada 50% subjek uji. Ukuran ini telah menjadi parameter standar dalam menilai toksisitas akut suatu bahan kimia atau obat-obatan (Paramveer et al., 2010). Dari lima senyawa yang dianalisis, hidrokuinon merupakan senyawa dengan potensi toksisitas oral akut paling tinggi berdasarkan nilai LD50 terendah sebesar 225 mg/kg.

Tabel.4 Tabel Hasil Uji Toksisitas

Senyawa	Predicted LD50	Toxicity Class
Flavonoid	5000mg/kg	V
Hidrokuinon	225mg/kg	III
Alkaloid	525mg/kg	IV
Fenol	270mg/kg	III
Terpenoid	5000mg/kg	V

Sementara itu, alkaloid memiliki nilai LD50 sebesar 525 mg/kg dan masuk dalam kelas toksisitas IV, yang berarti senyawa ini bersifat toksik dalam dosis tinggi namun masih lebih aman dibanding hidrokuinon dan fenol (EPA, 2012). Dengan demikian, berdasarkan uji toksisitas ini, flavonoid dan terpenoid memiliki potensi keamanan tertinggi, sedangkan hidrokuinon dan fenol perlu diwaspadai penggunaannya karena memiliki toksisitas sedang. Temuan ini memiliki relevansi etnobotani yang kuat, mengingat tanaman bajakah telah digunakan secara turun-temurun oleh masyarakat suku Dayak sebagai ramuan tradisional untuk mengobati berbagai penyakit. Pengetahuan lokal ini mencerminkan pemanfaatan tanaman obat yang diwariskan lintas generasi sebagai bagian dari kearifan lokal. Penelitian ini mendukung penelitian sebelumnya oleh (Nastati, 2022), yang menunjukkan bahwa tanaman bajakah bisa untuk penyembuhan penyakit seperti diare, pegal linu, luka, hingga dipercaya mampu mengobati kanker. Penelitian Selpi dkk.,(2024) juga mengungkapkan tanaman bajakah juga diketahui memiliki khasiat untuk membantu mengobati diabetes.

SIMPULAN

Penelitian ini menunjukkan bahwa lima senyawa aktif yang terkandung dalam batang Bajakah (*Spatholobus littoralis*) yaitu flavonoid, hidrokuinon, alkaloid, fenol, dan terpenoid memiliki potensi sebagai kandidat obat alami dan senyawa antioksidan berdasarkan analisis in silico. Seluruh senyawa memenuhi kriteria aturan Lipinski, yang menunjukkan kelayakan sebagai senyawa bioaktif yang dapat diserap dengan baik melalui saluran pencernaan. Kelima senyawa juga menunjukkan aktivitas antioksidan yang bervariasi, seperti kemampuan menangkap radikal bebas, inhibitor enzim oksidatif, hingga peran protektif terhadap membran sel.

Hasil prediksi ADMET mengindikasikan profil farmakokinetik yang cukup baik, dengan absorpsi gastrointestinal yang tinggi dan bioavailabilitas sedang. Dari aspek toksisitas, flavonoid dan terpenoid termasuk dalam kelas V (tidak beracun), alkaloid dalam kelas IV (toksik ringan), serta hidrokuinon dan fenol dalam kelas III (toksik sedang). Nilai LD50 terendah dimiliki oleh hidrokuinon sebesar 225 mg/kg, menunjukkan potensi toksisitas oral akut yang paling tinggi di antara kelima senyawa.

DAFTAR RUJUKAN

- Afifah, H., & Iskandar, Y. (2024). Review artikel: Kandungan kimia dan aktivitas farmakologi akar kayu bajakah (*Spatholobus littoralis* H). *Jurnal Penelitian Farmasi Indonesia*, 13(1), 12–17.
- Amiani, W., Fahrizal, M. R., & Aprelea, R. N. (2022). Kandungan metabolit sekunder dan aktivitas tanaman bajakah sebagai agen antioksidan. *Jurnal Health Sains*, 3(4), 516–522.
- Blake, M. J., et al. (2005). Role of P-glycoprotein in limiting brain penetration of drugs: Impact on treatment of CNS disorders. *CNS Drugs*, 19(5), 395–403.
- Chen, L., et al. (2023). Computational prediction of oral bioavailability and drug–drug interactions using ADMET modeling. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 63(2), 234–245.
- Coimbra, T., Lemos, T., & Almeida, V. (2021). Pharmacokinetic properties of natural compounds based on Lipinski's Rule of Five. *Journal of Natural Product Research*, 35(4), 302–310.
- Halim, R. (2013). Kelarutan senyawa aktif dalam pengembangan obat berbasis alam. *Jurnal Ilmu Kefarmasian Indonesia*, 11(2), 120–125.
- Kalalinggi, S. Y., Saputra, R. R., Wulandari, O. R., Gracia, A. N., & Imelya, M. (2024). Kajian etnobotani tanaman khas yang dimanfaatkan oleh masyarakat Kalimantan. *Bohr: Jurnal Cendekia Kimia*, 2(02).
- Kim, D., et al. (2015). Predicting drug–drug interactions mediated by cytochrome P450 enzymes using in silico models. *Archives of Pharmacal Research*, 38(12), 2126–2135.
- Lipinski, C. A. (2000). Drug-like properties and the causes of poor solubility and poor permeability. *Journal of Pharmacological and Toxicological Methods*, 44(1), 235–249.
- Nastiti, K., & Nugraha, D. F. (2022). Aktivitas antiinflamasi ekstrak kayu bajakah (*Spatholobus littoralis* Hask). *Jurnal Surya Medika (JSM)*, 7(2), 45–50.
- Nursanti, O., Liandra, D., Hadisoebroto, G., & Deswati, D. A. (2023). Molecular docking terhadap reseptor peroxisome proliferator-activated receptor-gamma (PPAR- γ) sebagai antidiabetes: Molecular docking on peroxisome proliferator-activated receptor-gamma (PPAR- γ) receptors as antidiabetic. *Medical Sains: Jurnal Ilmiah Kefarmasian*, 8(1), 315–324.

- Nusantoro, Y. R., & Fadlan, A. (2020). Evaluasi sifat ADME senyawa metabolit sekunder menggunakan SwissADME. *Jurnal Kimia dan Farmasi*, 5(1), 15–22.
- Pires, D. E. V., Blundell, T. L., & Ascher, D. B. (2015). pkCSM: Predicting small-molecule pharmacokinetic and toxicity properties using graph-based signatures. *Journal of Medicinal Chemistry*, 58(9), 4066–4072.
- Selipi, S., & Turnip, M. (2024). Studi etnobotani tumbuhan obat-obatan tradisional suku Melayu di Desa Mungguk Kecamatan Sekadau Hilir Kabupaten Sekadau. *Agroprimatech*, 8(1), 22–33.
- Shofi, M. (2021). Uji *in silico* aktivitas sitotoksik dan toksisitas senyawa bioaktif biji trembesi (*Samanea saman* (Jacq.) Merr) sebagai kandidat obat diabetes mellitus. *Jurnal Pharma Bhakta*, 1(2).
- Song, I. S., et al. (2021). Drug–drug interactions mediated by cytochrome P450 enzymes: A review. *Drug Metabolism and Pharmacokinetics*, 41, 1–12.
- Suciyati, A., & Retnaningati, D. (2024). Kajian etnobotani tanaman obat di Pasar Dayak Kalimantan Utara. *Borneo Journal of Biology Education (BJBE)*, 6(1), 45–54.
- Vélez, J. C., et al. (2022). Recent advances in oral bioavailability enhancement of natural products. *Current Drug Metabolism*, 23(2), 153–164.
- Wathan, N., Rina, R., Rahmah, N., Aulia, H., & Pujiarti, N. (2023). Etnobotani tumbuhan obat oleh warga Dayak Meratus di Desa Gunung Riut Kabupaten Balangan Kalsel. *Pharma Xplore: Jurnal Sains dan Ilmu Farmasi*, 8(1), 35–48.