



Analisis Potensi Antioksidan Senyawa Bioaktif Buah *Stelechocarpus burahol* secara In Silico dan Rekomendasi Pemanfaatannya

**Bintang Khoirun Nadzifah¹, Tutut Indah Sulistyowati^{1,4}, Sea Games Waluyo²,
Balqis³, Agus Muji Santoso^{1,4*}**

¹Program Studi Pendidikan Biologi, Fakultas Ilmu Kesehatan dan Sains,
Universitas Nusantara PGRI Kediri, Indonesia

²PT Science Werke, Jakarta, Indonesia

³Departemen Biologi, FMIPA, Universitas Negeri Malang

⁴Pusat Unggulan Biodiversitas, Universitas Nusantara PGRI Kediri

***Email korespondensi:** agusmujisantoso@unpkediri.ac.id

Diterima:
23 Juli 2025

Dipresentasikan:
26 Juli 2025

Terbit:
18 September 2025

ABSTRAK

Kepel termasuk salah satu tanaman buah tropis yang belum terdaftar dalam IUCN namun demikian populasinya semakin menurun dan bahkan sudah jarang ditemui. Konservasi tanaman Kepel memerlukan data base yang kompleks termasuk potensi buah Kepel. Termasuk potensi senyawa bioaktif yang terdapat dalam buah. Data tentang potensi senyawa bioaktif buah Kepel belum ada. Oleh karena itu, penelitian ini bertujuan untuk mengungkap potensi tiga senyawa utama dari ekstrak buah Kepel serta rekomendasi pemanfaatannya dalam pembangunan berkelanjutan. Penelitian berjenis deskriptif dengan pendekatan eksploratif selama bulan Juli 2025. Analisis biokomputasi (*in silico*) digunakan mulai tahapan eksplorasi struktur senyawa dan kode *canonical SMILES* dan penapisan aktivitas biologis masing-masing senyawa. Penelitian ini mengungkapkan bahwa senyawa epicatechin dan norwogonin yang terkandung dalam ekstrak buah Kepel memiliki aktivitas senyawa antioksidan yang sangat tinggi yaitu dengan skor *potential activity* (Pa) secara berurutan sebesar 0,810 dan 0,864. Hal tersebut menunjukkan bahwa buah Kepel memiliki potensi sebagai sumber antioksidan. Penelitian ini merekomendasikan agar dilaksanakan penelitian lanjutan untuk menggali interaksinya dengan protein fungsional atau enzim yang terdapat di dalam tubuh manusia sebagai sumber pangan fungsional. Selain itu, buah Kepel juga dapat direkomendasikan sebagai sumber antioksidan dalam pengembangan produk pangan fermentasi, farmasi, kosmetik, termasuk pengintegrasian sebagai salah satu sumber belajar yang kontekstual biologi yang berbasis potensi lokal untuk mendukung pembelajaran mendalam.

Kata Kunci : Antioksidan; *Stelechocarpus burahol*; sumber belajar; pembelajaran mendalam.

PENDAHULUAN

Berbagai jenis tanaman telah lama digunakan sebagai sumber obat tradisional oleh masyarakat. Penggunaan tanaman obat biasanya diturunkan dari nenek moyang dan telah menjadi budaya turun-menurun. Dengan bermacam-macam racikan, masyarakat kita menggunakan berbagai bagian tanaman seperti akar, batang, daun, hingga bunga sesuai dengan kebutuhan pengobatan. Biasanya

jenis tanaman yang digunakan adalah tanaman lokal yang berada di sekitar lingkungan tempat tinggal (Ramadani, dkk., 2025). Tanaman yang digunakan sebagai obat mengandung senyawa aktif yang dapat menimbulkan efek terapeutik bagi tubuh (Palawe, dkk., 2021).

Kepel (*Stelechocarpus burahol*) adalah salah satu tanaman lokal yang memiliki nilai budaya dan manfaat obat. Tanaman ini diduga sebagai salah satu spesies buah tropis asli Indonesia, yang tersebar di Indonesia, Malaysia, Kepulauan Solomon, hingga Australia. Tanaman ini dapat tumbuh di dataran rendah dengan kondisi penyinaran matahari yang cukup. Kepel bahkan dijadikan sebagai flora identitas Daerah Istimewa Yogyakarta karena nilai filosofi “Adiluhung” dan “Manunggaling sedya kaliyan gegayuhan” (Angio & Firdiana, 2021). Meskipun belum terdaftar di IUCN, namun keberadaannya sudah jarang ditemui. Tanaman ini dahulu hanya boleh ditanam di area keraton atau rumah pejabat, sehingga meskipun tidak dilarang, masyarakat umum merasa sungkan untuk menanamnya hingga saat ini.

Kepel dikenal secara tradisional sebagai tanaman yang digunakan untuk mengurangi bau tidak sedap pada tubuh, termasuk keringat, urin, dan napas, serta memiliki efek kontrasepsi alami (Angio & Firdiana, 2021). Selain itu, menurut Wahyu, dkk. (2022), rebusan daun kepel digunakan sebagai obat asam urat dan pencegah penuaan, sementara buahnya dimakan untuk memperlancar buang air kecil. Sejumlah penelitian telah mengungkap beberapa potensi dari bagian tanaman ini. Ekstrak etanol daun kepel diketahui memiliki aktivitas penangkap radikal bebas (Diniatik & Anis, 2016), menghambat kuat pertumbuhan bakteri penyebab jerawat (Magdalena, P., 2024), serta menunjukkan efek antihiperurisemia (Sunami, dkk., 2017). Selain itu, ekstrak buah kepel dilaporkan dapat mengurangi bau mulut (Amin, dkk., 2017).

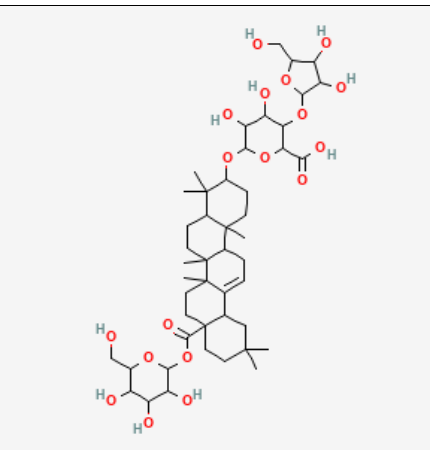
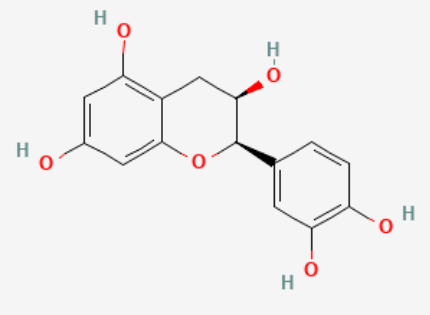
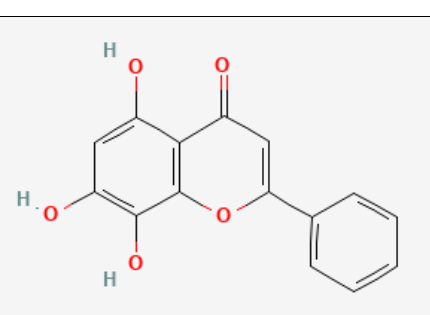
Konservasi tanaman kepel memerlukan database yang kompleks, termasuk potensi senyawa bioaktif yang terkandung di dalam buahnya. Namun demikian, eksplorasi terhadap potensi senyawa spesifik yang terkandung dalam buah kepel masih terbatas. Mengingat tanaman ini cukup sulit ditemui, maka pendekatan *in silico* menjadi alternatif yang tepat untuk mengeksplorasi potensi tanaman tanpa harus melakukan eksploitasi secara langsung. Dengan demikian, studi ini dilakukan sebagai langkah awal memetakan potensi farmakologi senyawa bioaktif buah kepel secara komputasional.

METODE

Penelitian dilakukan pada bulan Juli 2025 di Prodi Pendidikan Biologi Universitas Nusantara PGRI Kediri. Penelitian ini merupakan penelitian deskriptif eksploratif dengan menggunakan data sekunder. Penelitian ini menggunakan data dari penelitian Sundari, dkk., (2023) berupa hasil identifikasi senyawa-senyawa dari ekstrak metanol daging buah *S. burahol* dengan menggunakan *Liquid chromatography-mass spectrometry* (LC-MS) yang tersaji dalam **tabel 1**. Untuk menggali informasi tentang senyawa, portal PubChem (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>) digunakan, termasuk untuk mengakses data kode *Canonical SMILES*. Kode *Canonical SMILES* kemudian disalin ke server PASS

online Way2drug (<https://www.way2drug.com/passonline/predict.php>). Parameter Pa (*potential activity*) dan Pi (*potential inactivity*) akan menunjukkan hasil prediksi (Abkar, dkk., 2021). Penelitian ini menggunakan nilai batas $Pa > 0,7$. Dengan demikian, penelitian ini merupakan studi pendahuluan dengan memprediksi potensi dari senyawa yang terkandung dalam buah *S. burahol*.

Tabel 1. Senyawa dari ekstrak metanol daging buah *S. burahol*
(Sundari, dkk., 2023; NCBI, 2025)

Nama Senyawa	Canonical SMILES	Struktur 2D Senyawa
Chikusetsu saponin IV	<chem>CC1(CCC2(CCC3(C(=CCC4C3(CC5C4(CCC(C5(C)C)OC6C(C(C(C(O6)C(=O)O)OC7C(C(C(O7)CO)O)O)C)C2C1)C(=O)OC8C(C(C(C(O8)CO)O)O)C</chem>	
Epicatechin	<chem>C1[C@H]([C@H](OC2=CC(=CC(=C2)O)O)C3=CC(=C(C=C3)O)O)O</chem>	
Norwogonin	<chem>C1=CC=C(C=C1)C2=CC(=O)C3=C(O2)C(=C(C=C3O)O)O</chem>	

HASIL DAN PEMBAHASAN

Dalam penemuan obat baru, pendekatan *in silico* adalah langkah paling awal untuk mengidentifikasi aktivitas senyawa dan interaksinya dengan menggunakan lingkungan virtual. Secara umum, pendekatan *in silico* diakui sebagai alat yang memiliki berbagai keunggulan, seperti kemungkinan untuk personalisasi pengobatan, pengurangan keterlibatan hewan dan pasien dalam uji coba, serta hemat waktu dan biaya (Leo, dkk., 2022).

PASS merupakan perangkat lunak yang digunakan untuk melakukan penapisan terhadap suatu senyawa dengan menilai potensi aktivitas biologis umum dengan indikator *probability to active* (Pa) dan *probability to inactive* (Pi). Nilai Pa menunjukkan kemungkinan bahwa senyawa tergolong aktif, sedangkan nilai Pi akan menunjukkan sebaliknya. Penapisan pada PASS didasarkan pada struktur senyawa organik dan penapisan ini berfungsi untuk mendeteksi estimasi aktivitas biologis molekul secara virtual sebelum uji secara kimia dan biologis dilakukan (Muslih, dkk., 2025). Dengan penetapan ambang batas Pa di atas 0,7, maka indikasi aktivitas biologis suatu senyawa berada pada kategori sangat tinggi.

Hasil prediksi dari PASS menunjukkan masing-masing senyawa yang terkandung dalam buah kepel memiliki potensi yang beragam. Senyawa chikusetsu saponin IV, senyawa dari golongan saponin, memiliki potensi tinggi sebagai pelindung hati (*hepatoprotectant* dengan Pa=0,997), penghambat pertumbuhan kanker dan induksi apoptosis (*chemopreventive, caspase 3 stimulant, caspase 8 stimulant, antineoplastic, anticarcinogenic, apoptosis agonist*), *antitoxic* (Pa=0,879), antiinflamasi, antifungal, dan juga dalam mengkondisikan sistem imun (imunosupresan dan imunostimulan). Selain itu, terdeteksi aktivitas pencegahan dampak stress oksidatif, dimana terjadi ketidakseimbangan antara radikal bebas dan antioksidan dalam tubuh, melalui aktivitas lipid peroxidase inhibitor (Pa=0,958) yang akan menghambat proses peroksidasi lipid. Peroksidasi lipid sering kali dikaitkan dengan berbagai penyakit dan penuaan, seperti aterosklerosis, gangguan neurodegeneratif, katarak, dan lainnya (Niki, dkk., 2005). Aktivitas sebagai oxidoreductase inhibitor juga berperan dalam menghambat kerja enzim-enzim yang mengkatalisis reaksi redoks, sehingga senyawa chikusetsu saponin IV dapat menurunkan tingkat *reactive oxygen species* (ROS).

Epicatechin (EP), yang merupakan senyawa dari golongan polifenol, menunjukkan aktivitas yang sangat erat kaitannya dengan perlindungan jaringan dan membran (*membrane integrity agonist* Pa=0,983), penetral radikal bebas (Pa=0,842), antikanker (Pa=0,795), dan antioksidan (Pa=0,810). Senyawa ini juga berperan sebagai reduktan (Pa=0,799), dimana senyawa ini mampu menyumbangkan elektron pada senyawa oksidatif, sehingga reaksi oksidasi akan terhambat. Di samping itu, aktivitas peroxidase inhibitor juga cukup kuat dengan Pa 0,721. Aktivitas ini akan menghambat katalisis reaksi oksidasi dengan cara menghambat kerja enzim peroksidase (Barceló, 1998). Dengan aktivitas-aktivitas biologis tersebut, potensinya sebagai antioksidan alami untuk melindungi tubuh dari stres oksidatif sangat kuat.

Senyawa norwogonin, suatu polihidroksi flavon, telah terbukti memiliki aktivitas senyawa antitumor dengan pengujiannya pada sel kanker payudara (El-Hafeez, dkk., 2019). Melalui prediksi PASS, senyawa ini ternyata juga memiliki berbagai fungsi biologis, termasuk perlindungan sel, pengaturan stres oksidatif, dan regulasi sistem enzimatik tubuh. Senyawa ini diprediksi berperan dalam penangkalan radikal bebas (Pa=0,753) dan menghambat lipid peroksidase (Pa=0,756) yang biasanya memicu kerusakan pada membran. Aktivitas penghambatan pada dua enzim, yakni NADPH oxidase dan xanthine oxidase, juga

terdeteksi. Kedua enzim tersebut terlibat dalam pembentukan ROS sehingga penghambatannya akan mengurangi pembentukan radikal bebas (Magnani & Mattevi, 2019; Nagao, dkk., 1999). Tak hanya itu, senyawa norwogonin juga memiliki kemampuan sebagai *antimutagenic*, *antineoplastic*, dan *anticarcinogenic*. Aktivitas-aktivitas tersebut penting dalam mencegah transformasi seluler dan penghambatan progresi kanker. Secara ringkas, data hasil prediksi atau penapisan potensi antioksidan ketiga senyawa tersebut tersedia pada tabel 2.

Tabel 2. Prediksi PASS potensi aktivitas antioksidan dari daging buah *S. burahol*

Senyawa	Pa	Pi	Aktivitas
Chikusetsu saponin IV	0,958	0,002	Lipid peroxidase inhibitor
	0,873	0,003	Oxidoreductase inhibitor
Epicatechin	0,888	0,003	Lipid peroxidase inhibitor
	0,842	0,002	Free radical scavenger
	0,810	0,003	Antioxidant
	0,799	0,004	Reductant
	0,721	0,010	Peroxidase inhibitor
Norwogonin	0,941	0,002	Peroxidase inhibitor
	0,908	0,002	NADPH oxidase inhibitor
	0,864	0,003	Antioxidant
	0,753	0,003	Free radical scavenger
	0,756	0,004	Lipid peroxidase inhibitor
	0,749	0,002	Xanthine oxidase inhibitor

Antioksidan berperan sangat penting bagi metabolisme tubuh. Hal ini juga diperkuat dengan dasar bahwa sebagian besar penyakit diawali dari reaksi oksidasi berlebih di dalam tubuh (Sayuti & Yenrina, 2015). Sementara itu, radikal bebas bersifat reaktif dan bisa merusak makromolekul dan menyebabkan penyakit degeneratif. Apabila kadar radikal bebas melebihi batas proteksi antioksidan seluler, maka dibutuhkanlah antioksidan eksogen untuk menetralkannya dengan kemampuan donor elektron dan fungsi reduktor antioksidan. Aktivitas-aktivitas biologis dari buah kepel sangat berpotensi untuk dikembangkan menjadi

antioksidan eksogen, yang bisa mensuplai antioksidan dari luar tubuh dan membantu tubuh mengurangi dampak radikal bebas.

Aktivitas yang terdeteksi pada senyawa epicatechin cukup mirip dengan aktivitas senyawa norwogonin. Keduanya memiliki aktivitas antioksidan dan penangkal radikal bebas. Norwogonin mempunyai nilai Pa lebih tinggi untuk aktivitas antioksidan, sementara epicatechin lebih tinggi pada aktivitas penangkalan radikal bebas. Secara keseluruhan, ketiga senyawa menunjukkan potensinya dalam menghalau efek stress oksidatif, terutama pada senyawa epicatechin dan norwogonin yang memiliki potensi sebagai antioksidan dan “scavenger” radikal bebas.

Senyawa dari daging buah *S. burahol* ini memiliki potensi yang luar biasa untuk dikembangkan di berbagai sektor seperti pangan, farmasi, dan kosmetik. Namun, untuk memastikan keamanan dan efektivitas senyawa ini untuk digunakan secara nyata, dibutuhkan validasi lebih lanjut melalui uji *in silico* yang mendalam, uji *in vitro*, uji *in vivo*, hingga uji praklinis.

Selain bisa diterapkan dalam pengembangan obat dari bahan alam dan produk-produk berbasis potensi lokal, hasil dari penelitian ini juga dapat dimanfaatkan sebagai sumber belajar kontekstual dalam mata pelajaran biologi. Tingginya jumlah kasus penyakit yang disebabkan oleh stres oksidatif di Indonesia akan relevan dengan situasi nyata di masyarakat, sehingga dengan memahami risiko paparan radikal bebas dan potensi pangan lokal yang dapat menangkalnya akan memperkuat konsep biologi peserta didik.

KESIMPULAN

Hasil analisis *in silico* terhadap senyawa yang terkandung dalam ekstrak metanol daging buah *S. burahol* melalui prediksi PASS menunjukkan berpotensi sangat tinggi untuk menjadi antioksidan alami. Hal tersebut ditandai dengan kemunculan indikator aktivitas biologis pada senyawa utama seperti antioksidan, *free radical scavenger*, dan lipid peroxidase inhibitor. Hasil penapisan senyawa-senyawa pada buah kepel menjadi landasan yang kuat untuk eksplorasi manfaat dari buah kepel.

DAFTAR RUJUKAN

- Abkar, A. H., Djati, M. S., & Widodo, W. (2021). In silico study to predict the potential of beta asarone, methyl piperonylketone, coumaric acid in Piper crocatum as anticancer agents. *The Journal of Experimental Life Science*, 11(3), 89-99. <https://doi.org/10.21776/ub.jels.2021.011.03.04>
- Amin, A., Radji, M., Mun'im, A., Rahardjo, A., & Suryadi, H. (2017). Halitosis activity against volatile sulfur compound of methyl mercaptan component from burahol (*Stelechocarpus burahol*) fruit extract. *Asian J Pharm Clin Res*, 10(5), 116-119. <http://dx.doi.org/10.22159/ajpcr.2017.v10i5.15862>
- Angio, M. H., & Firdiana, E. R. (2021). Kepel (*Stelechocarpus burahol* (Blume) Hook & Thompson), buah langka khas keraton yogyakarta: sebuah koleksi kebun raya purwodadi. *Warta Kebun Raya*, 19(2), 7-13.



- Barceló, A. R. (1998). Use and misuse of peroxidase inhibitors. *Trends in Plant Science*, 3(11), 418. [https://doi.org/10.1016/S1360-1385\(98\)01335-1](https://doi.org/10.1016/S1360-1385(98)01335-1)
- Diniatik, D., & Anis, K. (2016). POTENSI PENANGKAPAN RADIKAL BEBAS HASIL HIDROLISIS EKSTRAK ETANOL DAUN KEPEL (*Stelechocarpus burahol*, (Bl.) Hook f. & Th.) DENGAN METODE DPPH. *Media Farmasi*. <https://doi.org/10.12928/mf.v13i2.7776>
- Abd El-Hafeez, A. A., Khalifa, H. O., Mahdy, E. A. M., Sharma, V., Hosoi, T., Ghosh, P., Ozawa, K., Montano, M. M., Fujimura, T., Ibrahim, A. R. N., Abdelhamid, M. A. A., Pack, S. P., Shouman, S. A., & Kawamoto, S. (2019). Anticancer effect of nor-wogonin (5, 7, 8-trihydroxyflavone) on human triple-negative breast cancer cells via downregulation of TAK1, NF- κ B, and STAT3. *Pharmacological reports : PR*, 71(2), 289–298. <https://doi.org/10.1016/j.pharep.2019.01.001>
- Leo, C. G., Tumolo, M. R., Sabina, S., Colella, R., Recchia, V., Ponzini, G., ... & Mincarone, P. (2022). Health technology assessment for in silico medicine: social, ethical and legal aspects. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 19(3), 1510. <https://doi.org/10.3390/ijerph19031510>
- MAGDALENA, P. P. (2024). AKTIVITAS PENGHAMBATAN EKSTRAK ETANOL DAUN KEPEL (*STELECHOCARPUS BURAHOL* L) TERHADAP BAKTERI *PROPIONIBACTERIUM ACNES*, *STAPHYLOCOCCUS AUREUS*, DAN *STAPHYLOCOCCUS EPIDERMIDIS* (Doctoral dissertation, UNIVERSITAS KRISTEN DUTA WACANA).
- Magnani, F., & Mattevi, A. (2019). Structure and mechanisms of ROS generation by NADPH oxidases. *Current opinion in structural biology*, 59, 91-97. <https://doi.org/10.1016/j.sbi.2019.03.001>
- Muslikh, F. A. (2025). Prediksi Druglikeness dan Potensi Aktivitas Biologis Senyawa Metabolit Sekunder Daun Asam Jawa (*Tamarindus indica*). *SINTA Journal (Science, Technology, and Agricultural)*, 6(1). <https://doi.org/10.37638/sinta.6.1.%25p>
- Nagao, A., Seki, M., & Kobayashi, H. (1999). Inhibition of xanthine oxidase by flavonoids. *Bioscience, biotechnology, and biochemistry*, 63(10), 1787-1790. <https://doi.org/10.1271/bbb.63.1787>
- National Center for Biotechnology Information (2025). PubChem Compound Summary for CID 15602013, Chikusetsusaponin IV. Diakses 17 Juli 2025 melalui <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Chikusetsusaponin-IV>
- National Center for Biotechnology Information (2025). PubChem Compound Summary for CID 72276, Epicatechin. Diakses 17 Juli 2025 melalui <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Epicatechin>
- National Center for Biotechnology Information. (2025). PubChem Compound

Summary for CID 5281674, Norwogonin. Diakses 17 Juli 2025 melalui <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Norwogonin>

- Niki, E., Yoshida, Y., Saito, Y., & Noguchi, N. (2005). Lipid peroxidation: mechanisms, inhibition, and biological effects. *Biochemical and biophysical research communications*, 338(1), 668-676. <https://doi.org/10.1016/j.bbrc.2005.08.072>
- Palawe, C. Y., Kairupan, C. F., & Lintong, P. M. (2021). Efek hepatoprotektif tanaman obat. *Medical Scope Journal*, 3(1), 61-73.
- Ramadani, A., Annisa, A. B. S., & Musdalifah, E. S. (2025). Prediksi komputasi potensi tanaman obat tradisional Sulawesi Selatan dari Familia Cucurbitaceae dengan platform Way2drug. <https://doi.org/10.35790/msj.v3i1.33542>
- Sayuti, I. K., & Yenrina, I. R. (2015). Antioksidan. *APPTI, Padang*.
- Sunarni, T., Fidrianny, I. R. D. A., Iwo, M. I., & Wirasutisna, K. R. (2017). Constituent and antihyperuricemic activity of *Stelechocarpus burahol* leaves subfractions. *Asian J Pharm Clin Res*, 10, 435-9. <http://dx.doi.org/10.22159/ajpcr.2017.v10i4.17021>
- SUNDARI, D., HANDAYANI, D. S., & SURYANTI, V. (2023, October). Compound identifications from methanol extract of kepel fruit flesh (*Stelechocarpus burahol*). In *Prosiding Seminar Nasional Masyarakat Biodiversitas Indonesia* (Vol. 9, No. 1, pp. 86-90).
- Wahyu, A. A., Nurmilawati, M., Sulitiyowati, T. I., Primandiri, P. R., & Santoso, A. M. (2022, December). Studi Etnobotani Tanaman Kepel (*Stelechocarpus burahol*) di Desa Adan-Adan, Kecamatan Gurah, Kabupaten Kediri. In *Prosiding Seminar Nasional Kesehatan, Sains dan Pembelajaran* (Vol. 2, No. 1, pp. 530-535).