

## Analisis In Silico Potensi Aktivitas Biologis Senyawa Volatil Asap Cair Tempurung Kelapa

### In Silico Analysis of the Potential Biological Activities of Volatile Compounds in Coconut Shell Liquid Smoke

Muhammad Andre Reynaldi<sup>1\*</sup>, Rafika Sari<sup>2</sup>, Abdurraafi' Maududi Dermawan<sup>1</sup>,  
Enggy Erwansani<sup>3</sup>, Shahiroh Haulaini<sup>3</sup>, Aulia Faradilla<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Bagian Kimia Farmasi, Program Studi Farmasi, Fakultas Kedokteran, Universitas Tanjungpura, Pontianak, Indonesia

<sup>2</sup>Bagian Biologi Farmasi, Program Studi Farmasi, Fakultas Kedokteran, Universitas Tanjungpura, Pontianak, Indonesia

<sup>3</sup>Bagian Farmasi Klinis, Program Studi Farmasi, Fakultas Kedokteran, Universitas Tanjungpura, Pontianak, Indonesia

<sup>4</sup>Unit Bioinformatika, Aixentha Computational Research Center, Pontianak, Indonesia

\*Email Korespondensi: [m.andrereynaldi@pharm.untan.ac.id](mailto:m.andrereynaldi@pharm.untan.ac.id)

#### ABSTRACT

Coconut shell liquid smoke contains various volatile compounds with potential biological activities that can be explored through computational approaches. This study aimed to predict the potential biological activities of volatile compounds identified in coconut shell liquid smoke using the PASS Online platform as an initial computational screening approach to identify promising natural bioactive compounds for further pharmacological investigation and drug discovery. Five representative volatile compounds reported in previous studies, namely 2-hydroxymethylphenol, 3-methoxybenzene-1,2-diol, 2-methoxyphenol, 2,6-dimethoxyphenol, and 4-methyl-1,2-benzenediol, were selected for analysis. Prediction of biological activities was performed using PASS Online based on the probability of activity (Pa) and probability of inactivity (Pi) values. The results showed that all compounds exhibited high potential biological activities with Pa values above 0.900. The dominant predicted activities included aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor, feruloyl esterase inhibitor, JAK2 expression inhibitor, membrane integrity agonist, and ubiquinol-cytochrome-c reductase inhibitor. Several compounds also demonstrated potential activities related to anti-inflammatory and antimicrobial mechanisms. The predicted activity profiles suggest that volatile phenolic compounds in coconut shell liquid smoke may represent promising candidates for further bioactivity exploration. However, these computational predictions require experimental validation through in vitro and in vivo studies before their biological potential can be confirmed.

**Keywords:** biological activity, coconut shell liquid smoke, in silico, PASS Online, volatile compounds

Received: Mei 2026; Accepted: Juni 2026; Published: 30 Juni 2026



©2026. Published by Bahiraliya Natura Science. This is Open Access article under the CC-BY-SA License (<http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>).

#### PENDAHULUAN

Asap cair tempurung kelapa merupakan produk hasil kondensasi asap dari proses pirolisis biomassa tempurung kelapa yang mengandung berbagai senyawa kimia volatil, terutama golongan fenolik, karbonil, dan asam organik. Senyawa-

senyawa tersebut diketahui memiliki berbagai aktivitas biologis seperti antimikroba, antioksidan, dan antiinflamasi sehingga berpotensi dikembangkan dalam bidang pangan, kesehatan, dan farmasi. Selain digunakan sebagai bahan pengawet alami, asap cair juga mulai banyak diteliti sebagai sumber senyawa

bioaktif berbasis bahan alam (Hadanu & Apituley, 2016; Kabir Ahmad et al., 2022).

Komponen fenolik merupakan salah satu kelompok senyawa volatil utama yang telah dilaporkan terdapat dalam asap cair tempurung kelapa berdasarkan hasil analisis komposisi kimia. Senyawa-senyawa tersebut, termasuk 2-methoxyphenol, 2,6-dimethoxyphenol, dan turunan fenolik lainnya, diketahui berkontribusi terhadap berbagai aktivitas biologis asap cair, seperti aktivitas antimikroba dan antioksidan. Karakteristik biologis tersebut dipengaruhi oleh struktur kimia dan gugus fungsi yang dimiliki masing-masing senyawa, sehingga identifikasi potensi aktivitas biologis setiap senyawa volatil menjadi penting untuk dilakukan (Kumar et al., 2025; Nabilla & Daulay, 2024).

Perkembangan metode komputasi memungkinkan identifikasi awal potensi biologis suatu senyawa dilakukan secara cepat melalui pendekatan *in silico*. Salah satu metode yang banyak digunakan adalah Prediction of Activity Spectra for Substances (PASS) Online yang mampu memprediksi spektrum aktivitas biologis berdasarkan hubungan struktur-aktivitas (*structure-activity relationship*). PASS Online dipilih dalam penelitian ini karena mampu memprediksi berbagai kemungkinan aktivitas biologis dari suatu senyawa hanya berdasarkan struktur kimianya tanpa memerlukan informasi target protein tertentu. Oleh karena itu, platform ini sesuai digunakan sebagai tahap penyaringan awal (initial screening) untuk mengeksplorasi potensi biologis senyawa volatil sebelum dilakukan analisis yang lebih spesifik, seperti molecular docking atau validasi eksperimental. Pendekatan ini dapat digunakan sebagai tahap awal dalam eksplorasi kandidat senyawa bioaktif sebelum dilakukan pengujian secara *in vitro* maupun *in vivo* (Reynaldi & Ropiqa, 2026; Zhang et al., 2025).

Penelitian mengenai asap cair tempurung kelapa umumnya masih berfokus pada karakterisasi kimia, kualitas produk, dan aktivitas antimikroba secara umum. Penelitian mengenai asap cair tempurung kelapa selama ini sebagian besar berfokus pada karakterisasi komposisi kimia menggunakan GC-MS, evaluasi mutu produk, serta pengujian aktivitas biologis secara eksperimental, seperti aktivitas antimikroba dan antioksidan. Meskipun berbagai senyawa fenolik volatil telah berhasil diidentifikasi, informasi mengenai potensi aktivitas biologis masing-masing senyawa secara individual masih sangat terbatas. Hingga saat ini, penerapan pendekatan *in silico*, khususnya menggunakan PASS Online untuk memprediksi spektrum aktivitas biologis senyawa volatil yang telah dilaporkan terdapat dalam asap cair tempurung kelapa, masih jarang dilaporkan. Oleh karena itu, penelitian ini dilakukan untuk memberikan informasi awal mengenai potensi biologis senyawa volatil sebagai dasar dalam penentuan kandidat senyawa yang layak untuk dievaluasi lebih lanjut melalui pendekatan komputasi lanjutan maupun validasi eksperimental.

## METODE

### Identifikasi Senyawa Volatil

Senyawa volatil yang dianalisis dalam penelitian ini tidak diperoleh dari hasil analisis GC-MS penelitian ini, melainkan dipilih dari data komposisi kimia asap cair tempurung kelapa yang telah dipublikasikan sebelumnya. Data senyawa mengacu pada hasil identifikasi menggunakan kromatografi gas-spektrometri massa (GC-MS) yang dilaporkan dalam literatur mengenai asap cair tempurung kelapa. Berdasarkan laporan tersebut, dipilih lima senyawa fenolik volatil yang dilaporkan terdapat dalam asap cair tempurung kelapa, yaitu 2-hydroxymethylphenol, 3-methoxybenzene-1,2-diol, 2-methoxyphenol, 2,6-dimethoxyphenol, dan 4-methyl-1,2-benzenediol.

Pemilihan kelima senyawa tersebut didasarkan pada keterwakilannya sebagai komponen fenolik volatil utama yang berkontribusi terhadap aktivitas biologis asap cair tempurung kelapa dan ketersediaan struktur kimia yang dapat dianalisis menggunakan PASS Online.

Struktur senyawa dituliskan dalam bentuk Simplified Molecular Input Line Entry System (SMILES) untuk digunakan pada tahap prediksi aktivitas biologis secara *in silico* (Fajriaty et al., 2023).

### **Prediksi Aktivitas Biologis Secara In Silico**

Prediksi aktivitas biologis dilakukan menggunakan webserver Prediction of Activity Spectra for Substances (PASS) Online (<http://www.way2drug.com/PASSOnline/>). Analisis dilakukan dengan memasukkan struktur senyawa dalam format SMILES yang diperoleh dan diverifikasi menggunakan database PubChem ke dalam sistem PASS Online untuk memperoleh nilai probability of activity (Pa) dan probability of inactivity (Pi). Nilai Pa menunjukkan probabilitas suatu senyawa memiliki aktivitas biologis tertentu, sedangkan nilai Pi menunjukkan probabilitas senyawa tidak memiliki aktivitas tersebut. Aktivitas biologis yang dianalisis merupakan aktivitas dengan nilai Pa tertinggi pada masing-masing senyawa. Interpretasi hasil prediksi dilakukan berdasarkan nilai Pa dengan kriteria  $Pa > 0,7$  menunjukkan potensi aktivitas biologis yang tinggi,  $0,5 < Pa < 0,7$  menunjukkan aktivitas sedang, sedangkan  $Pa < 0,5$  menunjukkan potensi aktivitas rendah namun masih memungkinkan untuk dikembangkan sebagai senyawa baru (Filimonov D.A., 2014).

### **Analisis Data**

Data hasil prediksi PASS Online dianalisis secara deskriptif dengan membandingkan profil aktivitas biologis dari masing-masing senyawa volatil. Aktivitas dominan kemudian diinterpretasikan berdasarkan mekanisme biologis yang berkaitan dengan potensi

antimikroba, antiinflamasi, dan aktivitas biologis lainnya.

## **HASIL DAN PEMBAHASAN**

Analisis *in silico* menggunakan PASS Online dilakukan terhadap lima senyawa volatil utama yang terdeteksi pada asap cair tempurung kelapa. Prediksi aktivitas biologis didasarkan pada nilai probability of activity (Pa) dan probability of inactivity (Pi). Semakin tinggi nilai Pa dan semakin rendah nilai Pi menunjukkan semakin besar kemungkinan suatu senyawa memiliki aktivitas biologis tertentu. Hasil prediksi menunjukkan bahwa seluruh senyawa volatil memiliki potensi aktivitas biologis yang tinggi dengan nilai Pa dominan di atas 0,900. Aktivitas dengan nilai Pa tertinggi meliputi aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor, feruloyl esterase inhibitor, linoleate diol synthase inhibitor, dan membrane integrity agonist, meskipun jenis aktivitas yang diprediksi berbeda pada setiap senyawa (Tabel 2). Aktivitas biologis yang teridentifikasi didominasi oleh aktivitas inhibisi enzim, modulasi integritas membran, dan penghambatan ekspresi protein (Fajriaty et al., 2023; Filimonov D.A., 2014).

Berdasarkan hasil prediksi PASS Online, aktivitas biologis dominan yang muncul pada hampir seluruh senyawa adalah aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor. Prediksi aktivitas sebagai aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor menunjukkan bahwa senyawa tersebut memiliki kemungkinan aktivitas berdasarkan kemiripan struktur dengan senyawa yang telah diketahui memiliki aktivitas serupa dalam basis data PASS Online. Oleh karena itu, hasil ini tidak dapat diinterpretasikan sebagai bukti langsung adanya mekanisme penghambatan enzim, melainkan sebagai hipotesis awal yang memerlukan validasi lebih lanjut. Selain itu, beberapa senyawa juga diprediksi memiliki aktivitas sebagai feruloyl esterase inhibitor dan linoleate diol

**Tabel 1.** Senyawa Volatil Asap Cair Tempurung Kelapa dan Struktur SMILES

No	Senyawa	Struktur SMILES
1	2-hydroxymethylphenol	<chem>C1=CC=C(C(=C1)CO)O</chem>
2	3-methoxybenzene-1,2-diol	<chem>COC1=CC=CC(=C1O)O</chem>
3	2-methoxyphenol	<chem>COC1=CC=CC=C1O</chem>
4	2,6-dimethoxyphenol	<chem>COC1=C(C(=CC=C1)OC)O</chem>
5	4-methyl-1,2-benzenediol	<chem>CC1=CC(=C(C=C1)O)O</chem>

**Tabel 2.** Hasil Prediksi Aktivitas Biologis Senyawa Volatil Asap Cair Tempurung Kelapa

Senyawa	Aktivitas Biologis	Pa	Pi
2-hydroxymethylphenol	Aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor	0,932	0,004
	Glucan endo-1,6-beta-glucosidase inhibitor	0,922	0,003
	Alkenylglycerophosphocholine hydrolase inhibitor	0,915	0,004
	Sugar-phosphatase inhibitor	0,908	0,004
	CYP2C12 substrate	0,902	0,011
3-methoxybenzene-1,2-diol	Aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor	0,961	0,002
	Feruloyl esterase inhibitor	0,940	0,003
	JAK2 expression inhibitor	0,928	0,002
	Chlordecone reductase inhibitor	0,919	0,004
	Ubiquinol-cytochrome-c reductase inhibitor	0,913	0,004
	Linoleate diol synthase inhibitor	0,912	0,003
	Membrane integrity agonist	0,910	0,009
2-methoxyphenol	Aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor	0,965	0,002
	Feruloyl esterase inhibitor	0,948	0,002
	JAK2 expression inhibitor	0,937	0,002
	Chlordecone reductase inhibitor	0,929	0,003
	Ubiquinol-cytochrome-c reductase inhibitor	0,924	0,004
	Membrane integrity agonist	0,921	0,006
	Aldehyde oxidase inhibitor	0,906	0,004
CYP2C12 substrate	0,900	0,012	
2,6-dimethoxyphenol	Aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor	0,965	0,002
	Feruloyl esterase inhibitor	0,933	0,003
	Ubiquinol-cytochrome-c reductase inhibitor	0,924	0,004
	JAK2 expression inhibitor	0,919	0,003
	Chlordecone reductase inhibitor	0,910	0,004
	Membrane integrity agonist	0,901	0,011
	CYP2C12 substrate	0,900	0,012
	Linoleate diol synthase inhibitor	0,898	0,004
4-methyl-1,2-benzenediol	CYP2C12 substrate	0,939	0,005
	Aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor	0,938	0,004
	Membrane integrity agonist	0,930	0,005
	Linoleate diol synthase inhibitor	0,925	0,003
	Alkane 1-monooxygenase inhibitor	0,923	0,002
	Feruloyl esterase inhibitor	0,923	0,003
	Chlordecone reductase inhibitor	0,914	0,004
	Ubiquinol-cytochrome-c reductase inhibitor	0,913	0,004
	Antiseborrheic	0,906	0,004
	Glutamyl endopeptidase II inhibitor	0,902	0,003
	Dehydro-L-gulonate decarboxylase inhibitor	0,901	0,003

synthase inhibitor. Prediksi tersebut menunjukkan adanya potensi aktivitas biologis berdasarkan analisis PASS Online, namun peran biologis spesifik dari aktivitas tersebut masih memerlukan kajian lebih lanjut dan validasi eksperimental.

Senyawa 2-methoxyphenol dan 2,6-dimethoxyphenol menunjukkan profil aktivitas biologis tertinggi dengan nilai Pa mencapai 0,965. Kedua senyawa tersebut termasuk golongan fenolik volatil yang diketahui memiliki aktivitas biologis melalui mekanisme donasi proton dan gangguan terhadap sistem membran sel mikroorganisme. Adanya gugus metoksi dan hidroksil pada struktur aromatik diduga berkontribusi terhadap tingginya nilai Pa yang diprediksi karena kedua gugus fungsi tersebut memengaruhi sifat elektronik dan kemampuan molekul membentuk interaksi, seperti ikatan hidrogen, dengan berbagai target biologis. Selain itu, jumlah dan posisi gugus metoksi maupun hidroksil pada cincin aromatik dapat menghasilkan perbedaan karakteristik struktur molekul yang selanjutnya memengaruhi pola prediksi aktivitas biologis berdasarkan hubungan struktur–aktivitas (*structure–activity relationship*) yang digunakan oleh PASS Online (Shehata et al., 2021).

Selain menunjukkan prediksi aktivitas biologis tertentu, beberapa aktivitas yang diprediksi oleh PASS Online memiliki kemiripan dengan mekanisme biologis yang dalam beberapa penelitian telah dikaitkan dengan efek antivirus. Namun, hubungan tersebut masih bersifat hipotetis dan didasarkan pada literatur pendukung, sehingga tidak dapat diinterpretasikan sebagai prediksi langsung terhadap aktivitas antivirus. Berdasarkan beberapa penelitian sebelumnya, aktivitas-aktivitas tersebut telah dikaitkan dengan jalur biologis yang berperan dalam regulasi respons imun, integritas membran sel, dan stres oksidatif, yang dalam kondisi tertentu juga berhubungan dengan proses infeksi virus. Namun, keterkaitan tersebut

merupakan interpretasi berdasarkan literatur dan bukan prediksi langsung yang dihasilkan oleh PASS Online (Chikhouné et al., 2025).

Aktivitas sebagai JAK2 expression inhibitor menunjukkan kemungkinan kemampuan senyawa dalam memodulasi jalur pensinyalan JAK/STAT yang berperan penting dalam regulasi inflamasi dan respons imun selama infeksi virus. Aktivasi jalur JAK/STAT yang berlebihan sering dikaitkan dengan peningkatan produksi sitokin proinflamasi pada beberapa penyakit infeksi virus. Oleh karena itu, senyawa yang mampu memodulasi ekspresi JAK2 berpotensi memberikan efek protektif melalui pengendalian respons inflamasi berlebih (Chikhouné et al., 2025; Vazquez-Armenta et al., 2022).

Selain itu, aktivitas membrane integrity agonist yang ditemukan terutama pada 4-methyl-1,2-benzenediol menunjukkan kemungkinan interaksi senyawa terhadap stabilitas membran biologis. Mekanisme tersebut berpotensi memengaruhi integritas membran virus beramplop (*enveloped virus*) yang sangat bergantung pada stabilitas membran lipid untuk proses adsorpsi, penetrasi, dan pelepasan virus dari sel inang. Senyawa fenolik volatil diketahui memiliki sifat lipofilik tertentu yang memungkinkan interaksi dengan membran biologis sehingga berpotensi mengganggu struktur membran mikroorganisme maupun virus (Sassi et al., 2021; Vazquez-Armenta et al., 2022).

PASS Online memprediksi aktivitas sebagai ubiquinol-cytochrome-c reductase inhibitor. Berdasarkan literatur, enzim ubiquinol-cytochrome-c reductase merupakan salah satu komponen rantai transpor elektron mitokondria yang berperan dalam homeostasis redoks sel. Oleh karena itu, keterkaitan antara aktivitas yang diprediksi dengan proses stres oksidatif dalam penelitian ini hanya merupakan interpretasi teoritis berdasarkan fungsi biologis enzim tersebut dan bukan prediksi langsung dari PASS

Online. Infeksi virus umumnya menyebabkan peningkatan pembentukan reactive oxygen species (ROS) yang berkontribusi terhadap kerusakan sel dan progresivitas penyakit. Senyawa fenolik dengan aktivitas antioksidan berpotensi membantu menekan stres oksidatif tersebut melalui mekanisme penangkapan radikal bebas maupun modulasi jalur oksidatif seluler (Li et al., 2018; Sassi et al., 2021).

Dominasi senyawa fenolik seperti 2-methoxyphenol dan 2,6-dimethoxyphenol dalam penelitian ini juga menjadi temuan penting karena golongan fenolik volatil telah banyak dilaporkan memiliki berbagai aktivitas biologis, termasuk antioksidan, antimikroba, antiinflamasi, dan potensi antiviral. Keberadaan gugus hidroksil dan metoksi pada cincin aromatik diduga berkontribusi terhadap kemampuan senyawa dalam mendonorkan atom hidrogen, menstabilkan radikal bebas, serta berinteraksi dengan protein biologis tertentu (Ashraf et al., 2024; Manful et al., 2025).

Keunggulan penelitian ini terletak pada penggunaan pendekatan *in silico* berbasis PASS Online yang mampu memberikan gambaran awal potensi biologis senyawa volatil secara cepat, efisien, dan ekonomis. Sebagai metode initial screening, PASS Online dapat digunakan untuk memprioritaskan senyawa yang berpotensi memiliki aktivitas biologis sebelum dilakukan studi lanjutan. Namun, metode ini memiliki keterbatasan karena prediksinya didasarkan pada hubungan struktur–aktivitas (*structure–activity relationship*) dan tidak dirancang untuk mengidentifikasi target biologis spesifik maupun menjelaskan mekanisme molekuler secara langsung. Oleh karena itu, hasil prediksi dalam penelitian ini perlu dikonfirmasi melalui pendekatan komputasi yang lebih spesifik, seperti target prediction atau molecular docking, serta divalidasi melalui pengujian *in vitro* dan *in vivo*. Pendekatan ini sangat bermanfaat dalam tahap awal eksplorasi kandidat senyawa bioaktif

berbasis bahan alam karena memungkinkan seleksi aktivitas biologis potensial sebelum dilakukan pengujian eksperimental yang lebih kompleks. Selain itu, penelitian ini juga memberikan informasi tambahan mengenai potensi biologis senyawa volatil asap cair tempurung kelapa yang selama ini lebih banyak dimanfaatkan sebagai bahan pengawet alami dan belum banyak dieksplorasi dalam bidang farmasi dan biomedis (Fajriaty et al., 2023; Filimonov D.A., 2014).

Meskipun demikian, penelitian ini masih memiliki beberapa keterbatasan. Prediksi aktivitas biologis yang diperoleh dari PASS Online bersifat teoritis berdasarkan hubungan struktur dan aktivitas senyawa sehingga belum dapat menggambarkan efektivitas biologis sebenarnya secara langsung. Nilai probability of activity (Pa) hanya menunjukkan kemungkinan aktivitas berdasarkan kemiripan struktur dengan senyawa dalam basis data PASS dan bukan merupakan bukti aktivitas biologis eksperimental. Selain itu, penelitian ini belum mengevaluasi interaksi spesifik senyawa terhadap target protein virus tertentu seperti main protease (Mpro), papain-like protease (PLpro), RNA-dependent RNA polymerase (RdRp), neuraminidase, maupun protein spike. Penelitian ini juga belum didukung oleh molecular docking, simulasi dinamika molekuler, analisis farmakokinetik, maupun pengujian toksisitas yang diperlukan untuk mengevaluasi potensi pengembangan senyawa sebagai kandidat obat (Li et al., 2018; Vazquez-Armenta et al., 2022).

Oleh karena itu, penelitian lanjutan diperlukan untuk melakukan validasi eksperimental melalui pengujian *in vitro* dan *in vivo* terhadap aktivitas biologis senyawa volatil asap cair tempurung kelapa. Pendekatan molecular docking dan simulasi dinamika molekuler terhadap target protein spesifik juga diperlukan untuk memperjelas mekanisme aksi dan potensi interaksi molekuler senyawa. Dengan

demikian, potensi pengembangan senyawa volatil asap cair tempurung kelapa sebagai kandidat senyawa bioaktif alami, termasuk kemungkinan aktivitas antiviral, dapat dibuktikan secara lebih komprehensif.

## KESIMPULAN

Hasil Prediksi komputasi menggunakan PASS Online menunjukkan bahwa lima senyawa volatil yang dilaporkan terdapat dalam asap cair tempurung kelapa memiliki berbagai aktivitas biologis yang diprediksi berdasarkan hubungan struktur–aktivitas (structure–activity relationship). Aktivitas yang paling sering diprediksi meliputi inhibitor enzim, modulator membran, dan inhibitor ekspresi protein tertentu dengan nilai probability of activity (Pa) yang tinggi. Berdasarkan jumlah aktivitas yang memiliki nilai Pa > 0,90, senyawa 2-methoxyphenol dan 2,6-dimethoxyphenol menunjukkan profil prediksi aktivitas biologis yang lebih tinggi dibandingkan senyawa lainnya. Hasil penelitian ini memberikan informasi awal untuk memprioritaskan kandidat senyawa bioaktif dari asap cair tempurung kelapa. Namun, seluruh aktivitas yang dilaporkan masih

## UCAPAN TERIMAKASIH

Penulis menyampaikan ucapan terima kasih kepada Universitas Tanjungpura atas dukungan dan fasilitas yang diberikan dalam pelaksanaan penelitian ini. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada semua pihak yang telah membantu proses penelitian sehingga penelitian ini dapat diselesaikan dengan baik.

## REFERENSI

- Ashraf, H., Tahtisham-UI-Haq, Butt, M. S., Nayik, G. A., Ramniwas, S., Damto, T., Ali Alharbi, S., & Ansari, M. J. (2024). Phytochemical and antioxidant profile of citrus peel extracts in relation to different extraction parameters. *International Journal of Food Properties*, 27(1), 286–299. <https://doi.org/10.1080/10942912.2024.2304274>
- Chikhoun, L., Poggi, C., Moreau, J., Dubucquoi, S., Hachulla, E., Collet, A., & Launay, D. (2025). JAK inhibitors (JAKi): Mechanisms of action and perspectives in systemic and autoimmune diseases. *La Revue de Médecine Interne*, 46(2), 89–106. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.revmed.2024.10.452>
- Fajriaty, I., Ih, H., Fidrianny, I., Kurniati, N. F., Reynaldi, M. A., Adnyana, I. K., Rommy, R., Kurniawan, F., & Tjahjono, D. H. (2023). In Vivo Pharmacodynamics of Calophyllum soulattri as Antiobesity with In Silico Molecular Docking and ADME/Pharmacokinetic Prediction Studies. *Pharmaceuticals*, 16(2). <https://doi.org/10.3390/ph16020191>
- Filimonov D.A., L. A. A. , G. T. A. , R. A. V. , D. D. S. , P. P. V. , P. V. V. (2014). Prediction of the biological activity spectra of organic compounds using the PASS online web resource. . *Chemistry of Heterocyclic Compounds*, 50(3), 444–457.
- Hadanu, R., & Apituley, D. A. N. (2016). Volatile Compounds Detected in Coconut Shell Liquid Smoke through Pyrolysis at a Fractioning Temperature of 350–420 °C. *Makara Journal of Science*, 20(3). <https://doi.org/10.7454/mss.v20i3.6239>
- Kabir Ahmad, R., Anwar Sulaiman, S., Yusup, S., Sham Dol, S., Inayat, M., & Aminu Umar, H. (2022). Exploring the potential of coconut shell biomass for charcoal production. *Ain Shams Engineering Journal*, 13(1), 101499. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.asej.2021.05.013>
- Kumar, S. S., Sonthalia, M., Jaiswal, A. K., Sadanandan, S., & Saritha, A. (2025). Highly tunable coconut shell lignin-gelatin crosslinked hydrogel for controlled drug delivery in wound healing. *International Journal of Biological Macromolecules*, 330, 148311. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijbioma.c.2025.148311>
- Li, R., Narita, R., Nishimura, H., Marumoto, S., Yamamoto, S. P., Ouda, R., Yatagai, M., Fujita, T., & Watanabe, T. (2018). Antiviral Activity of Phenolic Derivatives in Pyroligneous Acid from Hardwood, Softwood, and Bamboo. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 6(1), 119–126. <https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.7b01265>
- Manful, C. F., Fordjour, E., Subramaniam, D., Sey, A. A., Abbey, Lord, & Thomas, R. (2025). Antioxidants and Reactive Oxygen Species: Shaping Human Health and Disease Outcomes.

- International Journal of Molecular Sciences*, 26(15). <https://doi.org/10.3390/ijms26157520>
- Manik, M. E., & Herlinawati, H. (2021). Analysis of the Utilization of VCO as A Glucose Level Reducing Material in Brown Rice Using A UV-VIS Spectrophotometer. *Indonesian Journal of Chemical Science and Technology*, 4(1), 11–14. <https://doi.org/10.24114/ijcst.v4i1.23089>
- Nabilla, A., & Daulay, A. S. (2024). Science Midwifery Determination of secondary metabolite content of phenolic group from liquid smoke of coconut shell and husk (*Cocos nucifera* L.) using visible spectrophotometry. In *Science Midwifery* (Vol. 12, Number 5). Online. [www.midwifery.iocspublisher.org](http://www.midwifery.iocspublisher.org) [www.midwifery.iocspublisher.org](http://www.midwifery.iocspublisher.org)
- Reynaldi, M. A., & Ropiqa, M. (2026). Integration of Molecular Docking in the Identification of Natural Antioxidants: Interaction Study of Jackfruit Leaf Flavonoids with NADPH:FMN Oxidoreductase. *Journal of Food and Pharmaceutical Sciences*, 14(1). <https://doi.org/10.22146/jfps.26236>
- Sassi, A., Ascriczi, R., Chiboub, W., M'hamed, A., El Ayeb-Zakhama, A., harzallah-Skhiri, F., Saidani, M., Mastouri, M., & Flamini, G. (2021). Volatiles, phenolic compounds, antioxidant and antibacterial properties of kohlrabi leaves. *Natural Product Research*, 36, 1–6. <https://doi.org/10.1080/14786419.2021.1940177>
- Shehata, M. G., Awad, T. S., Asker, D., El Sohaimy, S. A., Abd El- Aziz, N. M., & Youssef, M. M. (2021). Antioxidant and antimicrobial activities and UPLC-ESI-MS/MS polyphenolic profile of sweet orange peel extracts. *Current Research in Food Science*, 4, 326–335. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.crfs.2021.05.001>
- Vazquez-Armenta, F. J., Leyva, J. M., Mata-Haro, V., Gonzalez-Aguilar, G. A., Cruz-Valenzuela, M. R., Esqueda, M., Gutierrez, A., Nazzaro, F., Fratianni, F., Gaitán-Hernández, R., & Ayala-Zavala, J. F. (2022). Phenolic compounds of *Phellinus* spp. with antibacterial and antiviral activities. *Brazilian Journal of Microbiology*. <https://doi.org/10.1007/s42770-022-00745-x>
- Zhang, Y., Xie, X., Yang, Y., Huang, L., Nan, G., Wang, X., Zhao, H., & Wu, Q. (2025). Efficient production, computational screening, molecular docking, quantum chemical calculations, and application of novel antioxidant peptides from Tartary buckwheat in composite preservation films. *Food Chemistry*, 482, 144115. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2025.144115>