

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA AKTIF *Stachytarpheta jamaicensis*
SEBAGAI ANTI INFLAMASI MENGGUNAKAN *CYTOSCAPE 3.7.1***

Skripsi

Diajukan guna memenuhi sebagian syarat
untuk memperoleh derajat Sarjana Kedokteran Gigi
Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Lambung Mangkurat

Diajukan Oleh

Aryandi Syaputra

2111111310019



**UNIVERSITAS LAMBUNG MANGKURAT
FAKULTAS KEDOKTERAN GIGI
PROGRAM STUDI KEDOKTERAN GIGI
BANJARMASIN**

Juli, 2025

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA AKTIF *Stachytarpheta jamaicensis*
SEBAGAI ANTI INFLAMASI MENGGUNAKAN *CYTOSCAPE 3.7.1***

Skripsi

Diajukan guna memenuhi sebagian syarat
untuk memperoleh derajat Sarjana Kedokteran Gigi
Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Lambung Mangkurat

Diajukan Oleh
Aryandi Syaputra
2111111310019



**UNIVERSITAS LAMBUNG MANGKURAT
FAKULTAS KEDOKTERAN GIGI
PROGRAM STUDI KEDOKTERAN GIGI
BANJARMASIN**

Juli, 2025

**HALAMAN PENETAPAN PANITIA PENGUJI
USULAN PENELITIAN SKRIPSI**

Usulan Penelitian Skripsi oleh Aryandi Syaputra
Telah dipertahankan di depan dewan penguji
Pada tanggal Juni 2024

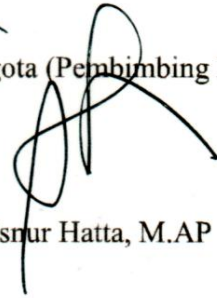
Dewan Penguji

Ketua (Pembimbing Utama)



Juliyatin Putri Utami, S.Si., M.Biomed

Anggota (Pembimbing Pendamping)



drg. Isnur Hatta, M.AP

Anggota



drg. Deby Kania Tri Putri, M.Kes

Anggota

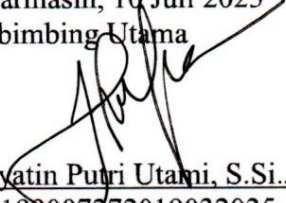


drg. Renie Kumala Dewi, Sp. KGA

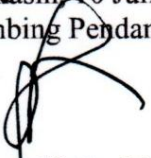
HALAMAN PERSETUJUAN UJIAN SKRIPSI

Skripsi oleh Aryandi Syaputra ini
Telah diperiksa dan disetujui untuk diseminarkan

Banjarmasin, 10 Juli 2025
Pembimbing Utama


(Juliyatin Putri Utami, S.Si., M.Biomed.)
NIP 199007272019032025

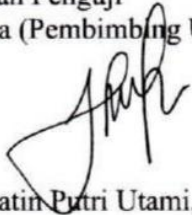
Banjarmasin, 10 Juli 2025
Pembimbing Pendamping


(drg. Isnur Hatta, M.AP)
NIP 196806091993031008

HALAMAN PENETAPAN PANITIA PENGUJI SKRIPSI

Skripsi oleh Aryandi Syaputra
Telah dipertahankan di depan dewan penguji
Pada tanggal 18 Juli 2025

Dewan Penguji
Ketua (Pembimbing Utama)



Juliyatin Putri Utami, S.Si., M.Biomed

Anggota (Pembimbing Pendamping)



drg. Ishur Hatta, M.AP

Anggota



drg. Deby Kania Tri Putri, M.Kes

Anggota



drg. Renie Kumala Dewi, Sp. KGA

Skripsi

**EFEKTIVITAS ANTIBAKTERI EKSTRAK DAUN KECAPI
(*SANDORICUM KOETJAPE MERR.*) TERHADAP PERTUMBUHAN
BAKTERI *PREVOTELLA INTERMEDIA* (STUDI IN VITRO)**


dipersiapkan dan disusun oleh

Aryandi Syaputra

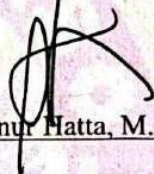
telah dipertahankan di depan dewan penguji
pada tanggal **18 Juli 2025**

Susunan Dewan Penguji

Pembimbing Utama


Juliyatin Putri Utami, S.Si., M.Biomed

Pembimbing Pendamping


drg. Isnur Hatta, M.AP

Penguji



drg. Deby Kania Tri Putri, M.Kes

Penguji


drg. Renie Kumala Dewi, Sp. KGA

Skripsi ini telah diterima sebagai salah satu persyaratan
untuk memperoleh gelar Sarjana Kedokteran Gigi




drg. Amy Nindia Carabelly, M.Si.
Koordinator Program Studi Kedokteran Gigi

HALAMAN PERNYATAAN ORIGINALITAS

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi ini merupakan hasil karya saya sendiri dan tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu perguruan tinggi. Semua sumber yang dikutip atau dirujuk dalam skripsi ini telah saya sebutkan dalam daftar pustaka.

Banjarmasin, 18 Juli 2025



Aryandi Syaputra

**HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS
AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS**

Sebagai civitas akademik Universitas Lambung Mangkurat, saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Aryandi Syaputra
NIM : 2111111310019
Program Studi : Kedokteran Gigi
Fakultas : Kedokteran Gigi
Jenis Karya : Skripsi

Demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Universitas Lambung Mangkurat Hak Bebas Royalti Noneksklusif (*Non-exclusive Royalty Free Right*) atas karya ilmiah saya yang berjudul:

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA AKTIF *Stachytarpheta jamaicensis*
SEBAGAI ANTI INFLAMASI MENGGUNAKAN *CYTOSCAPE 3.7.1***

Beserta perangkat yang ada (jika diperlukan). Dengan Hak Bebas Royalti Noneksklusif ini Universitas Lambung Mangkurat berhak menyimpan, mengalih media/format-kan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (*database*), merawat, dan mempublikasikan tugas akhir saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan sebagai pemilik Hak Cipta.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya

Dibuat di: Banjarmasin

Pada tanggal: 18 Juli 2025

Yang menyatakan



Aryandi Syaputra

RINGKASAN

STUDI *IN SILICO* SENYAWA AKTIF *Stachytarpheta jamaicensis* SEBAGAI ANTI INFLAMASI MENGGUNAKAN *CYTOSCAPE 3.7.1*

Inflamasi merupakan respons alami tubuh terhadap cedera, seperti yang terjadi setelah tindakan pencabutan gigi, yang menjadi masalah kesehatan signifikan di Kalimantan Selatan. Penggunaan obat-obatan modern seringkali disertai efek samping, sehingga mendorong pencarian alternatif dari bahan alam. Tanaman pecut kuda (*Stachytarpheta jamaicensis*) secara tradisional telah digunakan untuk penyembuhan luka dan pengobatan berbagai penyakit. Tanaman ini diketahui mengandung senyawa aktif seperti *Luvangetin* dan *Xanthyletin* yang berpotensi sebagai antiinflamasi. Seiring dengan perkembangan teknologi dan adanya keterbatasan pada uji konvensional, penelitian *in silico* menjadi metode yang efisien untuk penemuan kandidat obat.

Hasil analisis farmakologi jaringan menunjukkan bahwa Tumor Necrosis Factor (TNF), Interleukin-6 (IL6), dan Protein Kinase B (AKT1) merupakan tiga protein target utama yang paling berpengaruh dalam jaringan interaksi inflamasi. Hasil uji ADMET dan *drug-likeness* menunjukkan bahwa *Luvangetin* dan *Xanthyletin* memenuhi Aturan Lipinski (*Lipinski's Rule of Five*) dan memiliki profil farmakokinetik serta toksisitas yang baik, sehingga layak untuk dikembangkan sebagai obat. Hasil *molecular docking* menunjukkan bahwa *Xanthyletin* memiliki afinitas ikatan terkuat terhadap TNF dengan nilai -7,7 kkal/mol, diikuti oleh *Luvangetin* dengan nilai -7,5 kkal/mol. Nilai ini lebih baik dibandingkan dengan ligan pembanding Diclofenac (-7,0 kkal/mol). Interaksi kedua senyawa dengan protein target distabilkan oleh ikatan hidrogen dan hidrofobik pada residu asam amino kunci yang serupa dengan Diclofenac, yang mengindikasikan mekanisme kerja yang mirip. Senyawa aktif *Xanthyletin* dan *Luvangetin* dari *Stachytarpheta jamaicensis* memiliki potensi yang signifikan sebagai agen antiinflamasi dengan menargetkan protein kunci seperti TNF, IL6, dan AKT1. *Xanthyletin* menunjukkan potensi paling kuat berdasarkan afinitas ikatannya. Penelitian lebih lanjut secara *in vitro* dan *in vivo* disarankan untuk memvalidasi temuan ini.

SUMMARY

AN IN SILICO STUDY OF THE ACTIVE COMPOUNDS OF STACHYTARPHETA JAMAICENSIS AS AN ANTI-INFLAMMATORY USING CYTOSCAPE 3.7.1

Inflammation is a natural bodily response to injury, such as that occurring after tooth extraction, a significant health issue in South Kalimantan. The use of modern drugs is often accompanied by side effects, prompting the search for alternatives from natural sources. The snakeweed plant (Stachytarpheta jamaicensis) has been traditionally used for wound healing and treating various ailments. This plant is known to contain active compounds such as Luvangetin and Xanthyletin, which have potential as anti-inflammatory agents. In line with technological advancements and limitations in conventional testing, in silico research has become an efficient method for drug candidate discovery.

The network pharmacology analysis revealed that Tumor Necrosis Factor (TNF), Interleukin-6 (IL6), and Protein Kinase B (AKT1) were the three most influential target proteins in the inflammatory interaction network. The ADMET and drug-likeness tests showed that Luvangetin and Xanthyletin comply with Lipinski's Rule of Five and possess favorable pharmacokinetic and toxicity profiles, making them viable for drug development. Molecular docking results indicated that Xanthyletin had the strongest binding affinity towards TNF with a value of -7.7 kcal/mol, followed by Luvangetin at -7.5 kcal/mol. These values were better than that of the reference ligand, Diclofenac (-7.0 kcal/mol). The interactions of both compounds with the target proteins were stabilized by hydrogen and hydrophobic bonds at key amino acid residues similar to those of Diclofenac, suggesting a comparable mechanism of action. The active compounds Xanthyletin and Luvangetin from Stachytarpheta jamaicensis have significant potential as anti-inflammatory agents by targeting key proteins like TNF, IL6, and AKT1. Xanthyletin demonstrated the most potent potential based on its binding affinity. Further in vitro and in vivo studies are recommended to validate these findings.

ABSTRAK

STUDI *IN SILICO* SENYAWA AKTIF *Stachytarpheta jamaicensis* SEBAGAI ANTI INFLAMASI MENGGUNAKAN *CYTOSCAPE 3.7.1*

Aryandi Syaputra, Juliyatin Putri Utami, Isnur Hatta

Latar Belakang: Inflamasi pasca-tindakan medis seperti pencabutan gigi merupakan masalah umum yang memerlukan penanganan. Tanaman pecut kuda (*Stachytarpheta jamaicensis*) telah digunakan secara tradisional untuk antiinflamasi dan mengandung senyawa aktif *Luvangetin* dan *Xanthyletin*. Penelitian *in silico* menawarkan pendekatan yang cepat dan hemat biaya untuk mengeksplorasi potensi terapeutik dari senyawa alami. **Tujuan:** Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis potensi antiinflamasi dari senyawa aktif *S. jamaicensis* dengan mengidentifikasi target protein utama dan memvalidasi interaksinya melalui metode komputasi. **Metode:** Penelitian ini menggunakan pendekatan *in silico* melalui farmakologi jaringan dan penambatan molekuler. Gen-gen terkait inflamasi diidentifikasi dari basis data DisGeNET. Jaringan interaksi protein-protein (PPI) dianalisis menggunakan Cytoscape untuk menentukan protein hub berdasarkan *Degree*, *Betweenness Centrality* (BC), dan *Closeness Centrality* (CC). Sifat kelayakan obat (Lipinski) dan profil farmakokinetik (ADMET) dari senyawa *Luvangetin* dan *Xanthyletin* diuji. Penambatan molekuler dilakukan menggunakan PyRx (AutoDock Vina) untuk menganalisis interaksi senyawa dengan protein target, dengan Diclofenac sebagai kontrol. **Hasil:** Analisis jaringan berhasil mengidentifikasi TNF, IL6, dan AKT1 sebagai protein target utama dalam proses inflamasi. Kedua senyawa (*Luvangetin* dan *Xanthyletin*) menunjukkan profil kelayakan obat dan ADMET yang baik. Hasil penambatan molekuler menunjukkan afinitas ikatan yang kuat dari kedua senyawa terhadap protein target, di mana *Xanthyletin* menunjukkan ikatan paling stabil dibandingkan *Luvangetin*.

Kata Kunci: *Stachytarpheta jamaicensis*, Antiinflamasi, *In Silico*, *Molecular Docking*, *Xanthyletin*, *Luvangetin*, TNF, IL6, AKT1.

ABSTRACT

AN IN SILICO STUDY OF THE ACTIVE COMPOUNDS OF STACHYTARPHETA JAMAICENSIS AS AN ANTI-INFLAMMATORY USING CYTOSCAPE 3.7.1

Aryandi Syaputra, Juliyatin Putri Utami, Isnur Hatta

Background: Post-procedural inflammation, such as after tooth extraction, is a common problem requiring management. The snakeweed plant (*Stachytarpheta jamaicensis*) has been traditionally used for its anti-inflammatory properties and contains the active compounds Luvangetin and Xanthyletin. In silico research offers a rapid and cost-effective approach to exploring the therapeutic potential of natural compounds. **Objective:** This study aimed to analyze the anti-inflammatory potential of the active compounds from *S. jamaicensis* by identifying key protein targets and validating their interactions through computational methods. **Methods:** This research employed an in silico approach using network pharmacology and molecular docking. Inflammation-related genes were identified from the DisGeNET database. The protein-protein interaction (PPI) network was analyzed using Cytoscape to determine hub proteins based on Degree, Betweenness Centrality (BC), and Closeness Centrality (CC). The drug-likeness (Lipinski) and pharmacokinetic profiles (ADMET) of Luvangetin and Xanthyletin were evaluated. Molecular docking was performed using PyRx (AutoDock Vina) to analyze the interaction of the compounds with the target proteins, with Diclofenac serving as a control. **Results:** Network analysis successfully identified TNF, IL6, and AKT1 as the primary protein targets in the inflammatory process. Both compounds (Luvangetin and Xanthyletin) exhibited favorable drug-likeness and ADMET profiles. Molecular docking results showed strong binding affinities of both compounds towards the target proteins, with Xanthyletin displaying the most stable bond surpassing Luvangetin.

Keywords: *Stachytarpheta jamaicensis*, Anti-inflammatory, In Silico, Molecular Docking, Xanthyletin, Luvangetin, TNF, IL6, AKT1.

KATA PENGANTAR

Puji syukur ke hadirat Allah SWT, yang telah memberikan rahmat dan izin-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul "**Studi *In Silico* Senyawa *Stachytarpheta jamaicensis* Sebagai Antiinflamasi Menggunakan *Cytoscape 3.7.1***", tepat pada waktunya.

Skripsi ini disusun untuk memenuhi sebagian syarat guna memperoleh derajat sarjana kedokteran gigi di Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Lambung Mangkurat Banjarmasin. Dalam kesempatan ini penulis mengucapkan terima kasih kepada:

Dekan Fakultas Kedokteran Gigi, Prof. DR. drg. Maharani Laillyza Apriasari, Sp. PM yang telah memberikan kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.

Wakil Dekan I Fakultas Kedokteran Gigi, drg. Isnur Hatta, MAP yang juga menjadi pembimbing 2 saya yang berkenan memberikan saran serta arahan dalam penyelesaian skripsi ini.

Wakil Dekan II Fakultas Kedokteran Gigi, drg. I Wayan Arya Krishnawan Firdaus, M. Kes yang telah memberikan kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.

Wakil Dekan III Fakultas Kedokteran Gigi, drg. Deby Kania Tri Putri, M. Kes yang juga menjadi penguji 1 saya yang berkenan memberikan saran serta arahan dalam penyelesaian skripsi ini.

Koordinator Program Studi Kedokteran Gigi, drg. Amy Nindia Carabelly, M. Si yang telah memberikan kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.

Dosen pembimbing 1, Juliyatin Putri Utami, S. Si, M. Biomed yang juga telah berkenan memberikan saran serta arahan dalam penyelesaian skripsi ini.

Dosen Penguji 2, drg. Renie Kumala Dewi, Sp. KGA yang telah berkenan memberikan kritik dan saran sehingga skripsi ini menjadi lebih baik.

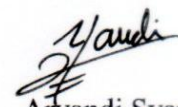
Seluruh staff pengajar di Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Lambung Mangkurat yang telah mendidik, membantu dan memberikan masukan kepada penulis selama menjalani masa pendidikan dan menyelesaikan skripsi ini.

Kedua orang tua, Bapak Abdar Asyari dan Ibu Yuni Astuti serta kakak Yudha Said Fitrah yang selalu memberikan perhatian dan dukungan penuh baik moril, materil, motivasi, harapan dan doa sampai terselesaikannya skripsi ini.

Rekan-rekan seperjuangan semasa kuliah, "pemili prenli", "tulayy (hanif, rin, sarah, tatta, bela)", Marvel Wendel, Lia Hidayah, Nor Rahman Sugiarto, Nurhana Nadhifah Mahdin, Gigih Nur Ifani Yusro, Muhammad Thoha, "Para Anomali" dan angkatan 2021 "Occlusal" yang lainnya, yang selalu membersamai, mendukung, serta memberikan semangat, doa, masukan, dan tawa dalam proses penyusunan skripsi ini, serta semua pihak yang tidak dapat penulis sebutkan satu persatu atas sumbangan pikiran dan bantuan yang telah diberikan.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih jauh dari kesempurnaan, tetapi penulis berharap penelitian ini bermanfaat bagi dunia ilmu pengetahuan terutama di bidang Kedokteran Gigi.

Banjarmasin, 14 Juli 2025


Aryandi Syaputra

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENETAPAN PANITIA PENGUJI SKRIPSI	ii
HALAMAN PERSETUJUAN UJIAN SKRIPSI	iii
HALAMAN PENETAPAN PANITIA PENGUJI SKRIPSI	iv
HALAMAN PENGESAHAN	v
HALAMAN PERNYATAAN ORIGINALITAS	vi
HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS	vii
RINGKASAN	viii
<i>SUMMARY</i>	ix
ABSTRAK.....	x
<i>ABSTRACT</i>	xii
KATA PENGANTAR	xiii
DAFTAR ISI	xiv
DAFTAR SINGKATAN	xviii
DAFTAR GAMBAR	xxi
DAFTAR TABEL	xxiii
DAFTAR LAMPIRAN	xxiv
BAB 1 PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	4
1.3 Tujuan	4
1.3.1 Tujuan Umum	4
1.3.2 Tujuan Khusus	4
1.4 Manfaat Penelitian	5
1.4.1 Manfaat Teoritis	5
1.4.2 Manfaat Praktis	5
1.4.3 Manfaat Bagi Masyarakat	5
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA	6

2.1 Pecut Kuda (<i>Stachytarpheta jamaicensis</i>)	6
2.1.1 Klasifikasi Tanaman Pecut Kuda	6
2.1.2 Senyawa Aktif Tanaman Pecut Kuda	7
2.1.2.1 Kumarin	7
2.1.2.1.1 <i>Luvangetin</i>	8
2.1.2.1.2 <i>Xanthyletin</i>	9
2.2 Ekstraksi Gigi	10
2.3 Proses Penyembuhan Luka <i>Pasca</i> Ekstraksi Gigi	11
2.4 Inflamasi	13
2.4.1 Definisi Inflamasi	13
2.4.2 Mediator Inflamasi	14
2.4.2.1 <i>Tumor Necrosis Factor alpha</i> (TNF- α)	14
2.4.2.2 <i>Interferon</i> (INF)	14
2.4.2.3 <i>Interleukin</i>	15
2.4.3 Faktor Penyebab Inflamasi	15
2.4.4 Gejala Inflamasi	16
2.5 Perawatan <i>Pasca</i> Ekstraksi	17
2.6 Studi <i>In Silico</i>	18
2.6.1 <i>DisGeNET</i>	18
2.6.2 <i>Protein Data Bank</i>	19
2.6.3 <i>PubChem</i>	20
2.6.4 <i>STRING 11.0</i>	20
2.6.5 <i>DAVID Bioinformatic</i>	21
2.6.6 <i>Cytoscape 3.7.1</i>	21
2.6.6.1 <i>Betweenness Centrality</i> (BC)	22
2.6.6.2 <i>Closeness Centrality</i> (CC)	22
2.6.7 <i>Molecular Docking</i>	22
2.6.7.1 <i>PyRx</i>	23
2.6.7.2 <i>BIOVIA Discovery Studio</i>	24
2.6.7.2.1 Ikatan Ion	24
2.6.7.2.2 Ikatan Hidrogen	25

2.6.7.2.3 Ikatan Van der Waals	25
2.6.7.2.3 Ikatan Kovalen	26
2.6.7.3 Uji <i>Drug-Likeness</i> (<i>Lipinski's Rule of Five</i>) dan Uji Farmakokinetik (Uji ADMET)	26
2.7 Kerangka Teori	30
2.7.1 Penjelasan Kerangka Teori	31
BAB 3 KERANGKA KONSEP	34
3.1 Kerangka Konsep	34
3.2 Penjelasan Kerangka Konsep	34
BAB 4 METODE PENELITIAN	35
4.1 Rancangan Penelitian	35
4.2 Variabel Penelitian	36
4.2.1 Variabel Bebas	36
4.2.2 Variabel Terikat	36
4.2.3 Definisi Operasional	36
4.3 Alat Penelitian	37
4.3.1 Perangkat Keras	37
4.3.2 Perangkat Lunak	38
4.4 Bahan Penelitian	40
4.4.1 Senyawa Aktif <i>Stachytarpheta jamaicensis</i>	40
4.4.2 Mediator Inflamasi	40
4.5 Prosedur Penelitian	41
4.5.1 Menganalisis Data <i>GO Enrichment</i> dan <i>KEGG Pathway</i> menggunakan <i>DAVID Bioinformatic</i>	41
4.5.2 Menghitung Nilai <i>Degree</i> , <i>Betweenness Centrality</i> dan <i>Closeness Centrality</i> Menggunakan <i>Cytoscape 3.7.1</i>	41
4.5.3 Pengunduhan Reseptor	42
4.5.4 Pengunduhan Ligan	42
4.5.5 Preparasi Reseptor	43
4.5.6 Persiapan Ligan	44
4.5.7 Uji ADMET (Adsorpsi, Distribusi, Metabolisme, Ekskresi, Toksisitas)	44

4.5.8 Validasi Metode <i>Docking</i>	45
4.5.9 <i>Molecular Docking</i>	45
4.5.10 Visualisasi Hasil <i>Docking</i>	47
4.6 Alur Uji <i>In Silico</i>	48
4.7 Prosedur Pengambilan atau Pengumpulan Data	49
4.8 Prosedur Pengolahan dan Analisis Data	49
BAB 5 HASIL PENELITIAN	50
5.1 Hasil GO <i>Enrichment</i> dan KEGG <i>Pathway</i>	50
5.1.1 Hasil GO <i>Enrichment</i> dan KEGG <i>Pathway Analysis</i> pada <i>Xanthyletin</i>	50
5.1.2 Hasil GO <i>Enrichment</i> dan KEGG <i>Pathway Analysis</i> pada <i>Luvangetin</i>	52
5.2 Nilai <i>Degree</i> , <i>Betweenness Centrality</i> dan <i>Closeness Centrality</i>	57
5.2.1 <i>Xanthyletin</i>	54
5.2.2 <i>Luvangetin</i>	56
5.4 Uji ADMET	62
5.5 Hasil <i>Molecular Docking</i>	64
BAB 6 PEMBAHASAN	76
6.1 Analisis Jalur Biologis dan Fungsional Senyawa Aktif	76
6.2 Identifikasi dan Peran Target Protein Utama	78
6.3 Analisis Farmakokinetik dan Toksisitas (ADMET)	81
6.4 Analisis Komparatif dengan Ligan Perbandingan (<i>Diclofenac</i>)	83
6.5 Visualisasi Interaksi Melalui <i>Molecular Docking</i>	83
BAB 7 KESIMPULAN DAN SARAN	86
7.1 Kesimpulan	86
7.2 Saran	87
DAFTAR PUSTAKA	
LAMPIRAN	

DAFTAR SINGKATAN

2D	: 2 Dimensi
3D	: 3 Dimensi
Å	: Amstrong
ADMET	: Absorpsi, Distribusi, Metabolisme, Ekskresi, dan Toksisitas
AID	: <i>Assay Identification</i>
BBB	: <i>Blood-Brain Barrier</i>
BC	: <i>Betweenness Centrality</i>
BP	: <i>Biological Process</i>
C	: <i>Celcius</i>
CC	: <i>Cellular Component</i>
CC	: <i>Closeness Centrality</i>
CID	: <i>Compound Identification</i>
COX-2	: <i>cyclooxygenase-2</i>
CSV	: <i>Comma Separated Value</i>
EGF	: <i>Epidermal Growth Factor</i>
FDR	: <i>False Discovery Rate</i>
GDA	: <i>Gene-Disease Association</i>
GO	: <i>Gene Ontology</i>
GWAS	: <i>genome-wide association studies</i>
HIA	: <i>Human Intestinal Absorption</i>
ID	: <i>Identification</i>
IGF	: <i>Insulin-like Growth Factor</i>

IL-1	: Interleukin-1
IL6	: Interleukin-6
IL-8	: Interleukin-8
IL-10	: Interleukin-10
INF- α	: Interferon-alpha
INF- β	: Interferon-beta
INF- γ	: Interferon-gamma
INF- λ	: Interferon-lambda
iNOS	: <i>Inducible Nitric Oxide Synthase</i>
KEGG	: <i>Kyoto Encyclopedia of Gene and Genome</i>
Log P	: <i>Logarithm of the partition coefficient</i>
MF	: <i>Molecular Function</i>
NIH	: <i>National Institutes of Health</i>
NLM	: <i>National Library of Medicine</i>
NO	: <i>Nitric Oxide</i>
PC	: <i>Personal Computer</i>
PDB	: <i>Protein Data Bank</i>
PDGF	: <i>Platelet-derived Growth Factor</i>
PGE2	: <i>Prostaglandin E2</i>
PPI	: <i>Protein-Protein Interaction</i>
RAM	: <i>Random Access Memory</i>
RCSB	: <i>Research Collaboratory for Structural Bioinformatics</i>
RMSD	: <i>Root Mean Square Deviation</i>

SID : *Substance Identification*

TGF- β : *Transforming growth factor-Beta*

TNF- α : *Tumor Necrosis Factor alpha*

TPSA : *Topological Polar Surface Area*

VDA : *Variant-Disease Association*

VDss : *Volume Distribution stabil situation*

DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
Gambar 2.1 a.) Tanaman Pecut Kuda, b.) Daun dan Bunga Tanaman Pecut Kuda (Dokumen Pribadi).....	6
Gambar 2.2 a.) Struktur 2D, b.) Struktur 3D senyawa <i>Luvangetin</i>	9
Gambar 2.3 a.) Struktur 2D, b.) Struktur 3D senyawa <i>Xanthyletin</i>	10
Gambar 2.4 Grafik Proses Penyembuhan Luka.....	11
Gambar 2.5 Proses Penyembuhan Luka.....	13
Gambar 2.6 Kerangka Teori Studi <i>in Silico</i> Senyawa Aktif <i>Stachytarpheta jamaicensis</i> Sebagai Antiinflamasi Menggunakan <i>Cytoscape</i> 3.7.1.....	30
Gambar 3.1 Kerangka Konsep Kerangka Teori Studi <i>in Silico</i> Senyawa Aktif <i>Stachytarpheta jamaicensis</i> Sebagai Antiinflamasi Menggunakan <i>Cytoscape</i> 3.7.1.....	34
Gambar 4.1 <i>DisGeNET</i>	37
Gambar 4.2 <i>Website</i> RCSB PDB.....	38
Gambar 4.3 <i>Website</i> PubChem.....	38
Gambar 4.4 <i>Website</i> DAVID <i>Bioinformatic</i>	39
Gambar 4.5 Aplikasi <i>Cytoscape</i>	39
Gambar 4.6 Aplikasi PyRx.....	39
Gambar 4.7 Aplikasi BIOVIA <i>Discovery Studio</i>	40
Gambar 4.8 <i>Website</i> PkCSM.....	40
Gambar 4.9 Alur Studi <i>in Silico</i>	48

Gambar 5.1 GO <i>enrichment</i> dan KEGG <i>pathway analysis</i> pada <i>Xanthyletin</i> terhadap target inflamasi (a) <i>Biological process</i> , (b) <i>Cellular components</i> , (c) <i>Molecular functions</i> , (d) <i>Kyoto Encyclopedia of Gene and Genome</i>	50
Gambar 5.2 GO <i>enrichment</i> dan KEGG <i>pathway analysis</i> pada <i>Luvangetin</i> terhadap target inflamasi (a) <i>Biological process</i> , (b) <i>Cellular components</i> , (c) <i>Molecular functions</i> , (d) <i>Kyoto Encyclopedia of Gene and Genome</i>	53
Gambar 5.3 Jaringan interaksi protein-protein dari target interseksi antara <i>Xanthyletin</i> dan inflamasi, menunjukkan bahwa dari warna kuning hingga merah, nilai target meningkat secara bertahap.....	56
Gambar 5.4 Jaringan interaksi protein-protein dari target interseksi antara <i>Luvangetin</i> dan inflamasi, menunjukkan bahwa dari warna kuning hingga merah, nilai target meningkat secara bertahap.....	58
Gambar 5.5 Struktur 2D & 3D Hasil <i>Docking</i> TNF dengan <i>Xanthyletin</i>	64
Gambar 5.6 Struktur 2D & 3D Hasil <i>Docking</i> IL6 dengan <i>Xanthyletin</i>	64
Gambar 5.7 Struktur 2D & 3D Hasil <i>Docking</i> AKT1 dengan <i>Xanthyletin</i>	64
Gambar 5.8 Struktur 2D & 3D Hasil <i>Docking</i> TNF dengan <i>Luvangetin</i>	65
Gambar 5.9 Struktur 2D & 3D Hasil <i>Docking</i> IL6 dengan <i>Luvangetin</i>	65
Gambar 5.10 Struktur 2D & 3D Hasil <i>Docking</i> AKT1 dengan <i>Luvangetin</i>	65
Gambar 5.11 Struktur 2D & 3D Hasil <i>Docking</i> TNF dengan <i>Diclofenac</i>	66
Gambar 5.12 Struktur 2D & 3D Hasil <i>Docking</i> IL6 dengan <i>Diclofenac</i>	66
Gambar 5.13 Struktur 2D & 3D Hasil <i>Docking</i> AKT1 dengan <i>Diclofenac</i>	66

DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
Tabel 4.1 Tabel Definisi Operasional.....	36
Tabel 4.2 Senyawa <i>Luvangetin</i> dan <i>Xanthyletin</i>	40
Tabel 4.3 Tabel Pengumpulan Data Nilai <i>Degree</i> , <i>betweenness Centrality</i> (BC) dan <i>Closeness Centrality</i> (CC).....	49
Tabel 4.4 Tabel Pengumpulan Data Hasil <i>Molecular Docking</i> Senyawa Aktif <i>Stachytarpheta jamaicensis</i> terhadap Inflamasi.....	49
Tabel 5.1 Interaksi Protein-Protein antara <i>Xanthyletin</i> dan Inflamasi Berdasarkan <i>Degree</i> , BC, dan CC.....	54
Tabel 5.2 Interaksi Protein-Protein Teratas antara <i>Luvangetin</i> dan Inflamasi Berdasarkan <i>Degree</i> , BC, dan CC.....	56
Tabel 5.3 Hasil Uji <i>Drug-Likeness</i> (<i>Lipinski's Rule of Five</i>).....	59
Tabel 5.4 Hasil Prediksi Uji Farmakokinetik (Uji ADME).....	59
Tabel 5.5 Hasil Prediksi Uji Toksisitas.....	60
Tabel 5.6 Hasil <i>Molecular Docking</i> Protein Target dengan <i>Xanthyletin</i> , <i>Luvangetin</i> dan <i>Diclofenac</i>	61

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran

1. Jadwal Kegiatan Penelitian
2. Rincian Biaya Penelitian
3. Hasil GO *Enrichment* dan KEGG *Pathways*
4. Hasil *Cytoscape* 3.7.1
5. Hasil Uji *Drug-Likeness* (*Lipinski's Rule of Five*) dan Uji ADMET
6. Hasil PyRx
7. Hasil BIOVIA *Discovery Studio*