

**STUDI *IN SILICO* ANTIINFLAMASI SENYAWA AKTIF
EKSTRAK DAUN RAMANIA (*Bouea macrophylla* Griff)
TERHADAP *NUCLEAR FACTOR KAPPA B* ACTIVATION
PATHWAY**

Skripsi

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

Diajukan Oleh
Olferd Natanael Rauw Kaose
211111310013



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

Juli, 2025

**STUDI *IN SILICO* ANTIINFLAMASI SENYAWA AKTIF
EKSTRAK DAUN RAMANIA (*Bouea macrophylla* Griff)
TERHADAP *NUCLEAR FACTOR KAPPA B* ACTIVATION
PATHWAY**

Skripsi

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

Diajukan Oleh
Olferd Natanael Rauw Kaose
2111111310013



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

Juli, 2025

HALAMAN PERSETUJUAN UJIAN SKRIPSI

Skripsi oleh Olferd Natanael Rauw Kaose ini
Telah diperiksa dan disetujui untuk diseminarkan

Banjarmasin, 18 Juli 2025
Pembimbing Utama



(Dr. drg. Irham Taufiqurrahman, M.Si.Med., Sp.B.M.M., Subsp.T.M.T.M.J. (K) FICS.)
NIP 197801062009121003

Banjarmasin,

Pembimbing Pendamping



(drg. Alexander Sitepu, MM.)
NIP.197103182000031003

**HALAMAN PENETAPAN PANITIA PENGUJI
SKRIPSI**

Skripsi oleh Olferd Natanael Rauw Kaose
Telah dipertahankan di depan dewan penguji
Pada tanggal ..10.. Juli 2025

Dewan Penguji
Ketua (Pembimbing Utama)



Dr. drg. Irham Taufiqurrahman, M.Si.Med., Sp.B.M.M.,
Subsp.T.M.T.M.J. (K) FICS.

Anggota (Pembimbing Pendamping)



drg. Alexander Sitepu, MM.

Anggota



Riky Hamdani, S.KM, M.Epid

Anggota



drg. Isyana Erlita, M.H., Sp. KG

Skripsi

Studi *In Silico* Antiinflamasi Senyawa Aktif Ekstrak Daun Ramania (*Bouea macrophylla* Griff) Terhadap Nuclear Factor Kappa B Activation Pathway

dipersiapkan dan disusun oleh

Olferd Natanael Rauw Kaose

telah dipertahankan di depan dewan penguji

pada tanggal **Juli 2025**

Susunan Dewan Penguji

Pembimbing Utama



Dr. drg. Irham Taufiqurrahman, M.Si.Med.,
Sp.B.M.M., Subsp.T.M.T.M.J. (K) FICS.

Pembimbing Pendamping



drg. Alexander Sitepu, MM.

Penguji



Riky Hamdani, S.KM, M.Epid

Penguji



drg. Isvana Erlita, M.H., Sp. KG

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



drg. Amy Niudia 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 ..⁶ Juli 2025



Olfred Natanael Rauw Kaose

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

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

Nama : Olfred Natanael Rauw Kaose

NIM : 2111111310013

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* ANTIINFLAMASI SENYAWA AKTIF EKSTRAK DAUN RAMANIA (*Bouea macrophylla Griff*) TERHADAP *NF-κB ACTIVATION PATHWAY*”

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



Olfred Natanael Rauw Kaose

RINGKASAN

STUDI *IN SILICO* ANTIINFLAMASI SENYAWA AKTIF EKSTRAK DAUN RAMANIA (*Bouea macrophylla* Griff) TERHADAP NUCLEAR FACTOR KAPPA B ACTIVATION PATHWAY

Luka adalah setiap jenis kerusakan jaringan kulit yang terjadi karena tindakan medis, kontak dengan panas, atau kondisi psikologis. Luka mengganggu fungsi dan struktur tubuh. Luka dapat dikategorikan sebagai akut atau kronik berdasarkan lamanya proses penyembuhannya. Proses penyembuhan luka diawali fase inflamasi. *Nuclear Factor Kappa B (NF- κ B)* adalah faktor transkripsi yang terlihat di mana-mana dan berperan penting dalam banyak sistem biologis. Pengobatan luka dapat dengan pemberian obat antiinflamasi. Dalam meminimalisir terjadinya efek samping dari penggunaan obat kimia, tanaman Ramania (*Bouea macrophylla* Griff) merupakan salah satu tanaman di Indonesia yang dapat dijadikan sebagai obat herbal yang memiliki beberapa senyawa aktif yang mengandung sifat antioksidan, antibakteri, antiinflamasi dan analgesik. Dalam mengetahui efek senyawa aktif ekstrak daun ramania terhadap *NF- κ B* dapat diteliti melalui *In silico* yang merupakan metode penelitian dengan memanfaatkan teknologi komputasi dan database untuk menganalisis probabilitas suatu kandidat obat. Metode *In silico* digunakan pada penelitian ini untuk mengetahui apakah senyawa aktif ekstrak daun ramania (*Bouea macrophylla* Griff) memiliki potensi sebagai kandidat obat antiinflamasi melalui penghambatan aktivitas *NF- κ B*.

Penelitian ini merupakan penelitian jenis eksperimental dengan metode *In silico* untuk memprediksi apakah senyawa aktif ekstrak daun ramania berinteraksi dengan *NF- κ B* melalui bantuan database dan sistem komputer. Penelitian ini digunakan dengan teknik *molecular docking* yang akan dianalisis melalui visualisasi. Senyawa aktif ekstrak daun ramania dilakukan uji *Lipinski's Rule of Five*, uji toksisitas serta uji farmakokinetika terlebih dahulu kemudian dilanjutkan dengan uji *docking*. Parameter yang dianalisis dari hasil *docking* ialah *binding affinity*, RMSD, residu asam amino, jarak ikatan dan jenis interaksi. Berdasarkan evaluasi komprehensif profil *In silico* (efikasi, keamanan, dan farmakokinetika), *Caryophyllene* dan *γ -himachalene* merupakan kandidat yang sangat menjanjikan sebagai agen anti-inflamasi dari ekstrak daun ramania. Keduanya menunjukkan kombinasi afinitas ikatan yang sangat kuat, kepatuhan penuh terhadap *Lipinski's Rule of Five*, tidak bersifat hepatotoksik, serta memiliki penyerapan usus dan distribusi yang sangat baik. Meskipun *Retinol Acetate* memiliki *binding affinity* yang sedikit lebih baik, prediksinya sebagai hepatotoksik menjadi pertimbangan utama. Selain itu, senyawa *oxiraneundecanoic acid*, *3-pentyl-*, *methyl ester*, *trans-* juga merupakan kandidat yang patut dipertimbangkan lebih lanjut karena profil keamanannya yang sangat baik (tidak hepatotoksik dan nilai LOAEL yang tinggi), meskipun *binding affinity*-nya tidak setinggi kandidat lain

SUMMARY

STUDI IN SILICO ANTIINFLAMASI SENYAWA AKTIF EKSTRAK DAUN RAMANIA (*Bouea macrophylla* Griff) TERHADAP NUCLEAR FACTOR KAPPA B ACTIVATION PATHWAY

Wounds are any type of skin tissue damage that occurs due to medical procedures, contact with heat, or psychological conditions. Wounds disrupt the body's functions and structures. Wounds can be categorized as acute or chronic based on their healing duration. The wound healing process begins with the inflammatory phase. Nuclear Factor Kappa B (NF- κ B) is a ubiquitous transcription factor that plays a crucial role in many biological systems. Wound treatment can involve the administration of anti-inflammatory drugs. To minimize the side effects of chemical drug use, Ramania (*Bouea macrophylla* Griff) is one of Indonesia's plants that can be used as a herbal medicine, possessing several active compounds with antioxidant, antibacterial, anti-inflammatory, and analgesic properties. To determine the effect of ramania leaf extract's active compounds on NF- κ B, *In silico* methods can be employed. This research method utilizes computational technology and databases to analyze the probability of a drug candidate. *In silico* methods were used in this study to determine whether the active compounds of *Bouea macrophylla* Griff (ramania) leaf extract possess potential as anti-inflammatory drug candidates by inhibiting NF- κ B activity.

This study was an experimental *In silico* research aimed at predicting whether the active compounds of ramania leaf extract interact with NF- κ B, utilizing databases and computer systems. This research employed molecular docking techniques, which were analyzed through visualization. The active compounds of ramania leaf extract underwent Lipinski's Rule of Five testing, toxicity testing, and pharmacokinetic testing prior to the docking simulations. Parameters analyzed from the docking results included binding affinity, RMSD, amino acid residues, bond distance, and interaction types. Based on a comprehensive *In silico* evaluation of efficacy, safety, and pharmacokinetic profiles, Caryophyllene and γ -himachalene emerge as very promising anti-inflammatory agents from ramania leaf extract. Both demonstrate a combination of very strong binding affinity, full compliance with Lipinski's Rule of Five, are non-hepatotoxic, and exhibit excellent intestinal absorption and distribution. Although Retinol Acetate showed slightly better binding affinity, its predicted hepatotoxicity is a major consideration. Furthermore, oxiraneundecanoic acid, 3-pentyl-, methyl ester, trans- is also a candidate worthy of further consideration due to its excellent safety profile (non-hepatotoxic and high LOAEL value), even though its binding affinity is not as high as other candidates.

ABSTRAK

Studi *In Silico* Antiinflamasi Senyawa Aktif Ekstrak Daun Ramania (*Bouea macrophylla* Griff) Terhadap *Nuclear Factor Kappa B* Activation Pathway

**Olferd Natanael Rauw Kaose, Irham Taufiqurrahman, Alexander Sitepu,
Riky Hamdani, Isyana Erlita**

Latar Belakang: Peradangan kronis yang dimediasi jalur *NF-κB* berperan penting dalam berbagai penyakit degeneratif, sehingga pengembangan kandidat inhibitor dari sumber alam menjadi urgensi penelitian ini. Daun ramania (*Bouea macrophylla* Griff.) diketahui mengandung senyawa aktif yang berpotensi sebagai agen antiinflamasi. **Tujuan:** Menganalisis ikatan senyawa aktif ekstrak daun ramania (*Bouea macrophylla* Griff) terhadap aktivitas penghambatan *NF-κB* sebagai antiinflamasi melalui metode *in silico*. **Metode:** Evaluasi dilakukan menggunakan *Lipinski's Rule of Five* untuk *drug-likeness*, prediksi toksisitas (AMES, hepatotoksitas, dan LOAEL), farmakokinetika (HIA, VDss, Caco-2 permeability, CYP2D6 inhibition, dan clearance), serta *molecular docking* untuk menilai afinitas ikatan senyawa aktif terhadap *NF-κB*. **Hasil:** Sebagian besar senyawa ekstrak daun ramania (*Bouea macrophylla* Griff.) memenuhi *Lipinski's Rule of Five*, menunjukkan potensi *drug-likeness* dan bioavailabilitas oral yang baik. Uji toksisitas memprediksi semua senyawa non-mutagenik, meskipun *Retinol Acetate* dan ligan pembanding Artemin terdeteksi hepatotoksik. Analisis farmakokinetika menunjukkan penyerapan usus tinggi (>80%) dan tidak ada hambatan terhadap CYP2D6. *Molecular docking* mengungkapkan *Retinol Acetate* memiliki afinitas ikatan terbaik terhadap *NF-κB* (-6,2 kcal/mol), diikuti *γ-Himachalene* dan *Caryophyllene*. **Kesimpulan:** Senyawa ekstrak daun ramania berpotensi sebagai kandidat obat oral penghambat *NF-κB*, dengan *Retinol Acetate* paling poten namun terdeteksi hepatotoksik, sedangkan *Oxiraneundecanoic acid* menunjukkan profil keamanan terbaik. Validasi lebih lanjut melalui studi *in vitro* dan *in vivo* diperlukan untuk memastikan efektivitas dan keamanannya.

Kata kunci : Antiinflamasi, *In silico*, *molecular docking*, *NF-κB*, ramania.

ABSTRACT

An In Silico Study Anti-Inflammatory Activity Of Active Compounds Of Ramania Leaf Extract (Bouea macrophylla Griff) Against Nuclear Factor Kappa B Activation Pathway

**Olferd Natanael Rauw Kaose, Irham Taufiqurrahman, Alexander Sitepu,
Riky Hamdani, Isyana Erlita**

Background: Chronic inflammation mediated by the NF- κ B pathway plays a critical role in various degenerative diseases, making the discovery of natural-source inhibitors an urgent need. Ramania (*Bouea macrophylla* Griff.) leaves are known to contain bioactive compounds with potential anti-inflammatory properties. **Objective:** To analyze the binding of active compounds from *Bouea macrophylla* Griff (*ramania*) leaf extract to NF- κ B, as an anti-inflammatory activity, using an *In silico* method. **Method:** Evaluation were conducted using Lipinski's Rule of Five for drug-likeness, predicted toxicity (AMES, hepatotoxicity, and LOAEL), pharmacokinetics (HIA, VD_{ss}, Caco-2 permeability, CYP2D6 inhibition, and clearance), and molecular docking to assess the binding affinity of the compounds to NF- κ B. **Results:** Most compounds from *ramania* (*Bouea macrophylla* Griff.) leaf extracts complied with Lipinski's Rule of Five, indicating favorable drug-likeness and oral bioavailability. Toxicity prediction classified all compounds as non-mutagenic, although Retinol Acetate and the reference ligand Artemin showed potential hepatotoxicity. Pharmacokinetic analysis indicated high intestinal absorption (>80%) with no CYP2D6 inhibition. Molecular docking revealed Retinol Acetate had the strongest binding affinity to NF- κ B (-6.2 kcal/mol), followed by γ -Himachalene and Caryophyllene. **Conclusion:** Ramania leaf extract compounds show potential as oral NF- κ B inhibitors, with Retinol Acetate being the most potent but predicted hepatotoxic, while Oxiraneundecanoic acid demonstrated the best safety profile. Further *in vitro* and *in vivo* validation is required to confirm their efficacy and safety.

Keywords: Anti-inflammatory, *In silico*, molecular docking, NF- κ B, *ramania*.

KATA PENGANTAR

Puji syukur ke dipanjatkan kepada Tuhan Yang Maha Esa sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Studi *In Silico* Antiinflamasi Senyawa Aktif Ekstrak Daun Ramania (*Bouea macrophylla* Griff) Terhadap *Nuclear Factor Kappa B Activation Pathway*” tepat pada waktunya.

Skripsi ini disusun untuk memenuhi sebagian syarat guna memperoleh derajat Sarjana Kedokteran Gigi di Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Lambung Mangkurat. Dalam kesempatan ini penulis mengucapkan terimakasih kepada: Dekan Fakultas Kedokteran Gigi, Prof. Dr. drg. Maharani Laillyza Apriasari, Sp. PM yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian. Ketua Program Studi Fakultas Kedokteran Gigi, drg. Amy Nindia Carabelly, M.Si atas dukungannya dalam pelaksanaan penelitian ini. Kedua dosen pembimbing, Dr. drg. Irham Taufiqurrahman, M.Si.Med., Sp.B.M.M., Subsp.T.M.T.M.J. (K) FICS dan drg. Alexander Sitepu, MM yang dengan sabar memberikan saran serta arahan dalam penyelesaian skripsi ini. Kedua dosen penguji, Riky Hamdani, S.KM, M.Epid dan drg. Isyana Erlita, M.H., Sp. KG yang telah memberikan kritik dan saran sehingga skripsi ini menjadi semakin 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.

Terima kasih yang mendalam kepada kedua orangtua dan tiga adik tercinta. saya cintai yang selalu memberikan perhatian dan dukungan penuh baik moril, materil, motivasi, harapan, dan doa sampai terselesaikannya skripsi ini. Rekan-rekan seperjuangan di Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Lambung Mangkurat angkatan 2021 yang selalu membersamai dan memberikan masukan dan semua pihak yang telah membantu proses penelitian 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, akan tetapi penulis berharap penelitian ini bermanfaat bagi dunia ilmu pengetahuan terutama di bidang Kedokteran Gigi.

Banjarmasin, 18 Juli 2025



Penulis

DAFTAR ISI

HALAMAN SAMPUL	i
HALAMAN PERSETUJUAN UJIAN SKRIPSI ..Error! Bookmark not defined.	
HALAMAN PENETAPAN PANITIA PENGUJI .Error! Bookmark not defined.	
HALAMAN PERNYATAAN ORIGINALITAS ...Error! Bookmark not defined.	
HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS .Error! Bookmark not defined.	
RINGKASAN	viii
SUMMARY	ix
ABSTRAK	x
ABSTRACT	xi
KATA PENGANTAR	xii
DAFTAR ISI	xiv
DAFTAR SINGKATAN	xviii
DAFTAR TABEL	xx
DAFTAR GAMBAR	xxi
DAFTAR LAMPIRAN	xxiii
BAB 1 PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	5
1.3 Tujuan Penelitian.....	5
1.3.1 Tujuan Umum Penelitian	5
1.3.2 Tujuan Khusus Penelitian	5
1.4 Manfaat Penelitian.....	6
1.4.1 Manfaat Teoritis	6
1.4.2 Manfaat Praktis	6
1.4.3 Manfaat Bagi Masyarakat	6
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA	7
2.1 Ekstraksi Gigi.....	7
2.2 Definisi Luka.....	7
2.3 Jenis Luka	7
2.4 Proses Penyembuhan Luka	8

2.4.1 Fase Inflamasi Awal (Fase Hemostasis)	8
2.4.2 Fase Inflamasi Akhir (Lag Phase).....	10
2.4.3 Fase Proliferasi.....	10
2.4.4 Fase Maturasi (Remodelling)	11
2.5 <i>Non-steroidal anti-inflammatory drugs</i> (NSAID)	11
2.6 <i>Ramania (Bouea macrophylla</i> Griff)	12
2.6.1 Morfologi <i>Ramania</i>	13
2.6.2 Taksonomi <i>Ramania</i>	14
2.6.3 Manfaat <i>Ramania</i>	14
2.7 <i>In vitro</i>	16
2.8 <i>In vivo</i>	16
2.9 <i>In silico</i>	16
2.9.1 <i>Molecular Docking</i>	17
2.10 <i>NF-κB Activation Pathway Receptors</i>	19
2.10.1 Jalur Persinyalan <i>NF-κB Activation Pathway Receptors</i>	20
2.10.2 Inhibitor <i>NF-κB Activation Pathway Receptors</i>	22
2.11 Interaksi Ikatan	24
2.11.1 Ikatan Hidrogen.....	24
2.11.2 Ikatan Ion.....	25
2.11.3 Ikatan Dipol-Dipol	25
2.11.4 Van Der Waals	25
2.11.5 Ikatan Kovalen	25
2.12 Perangkat Lunak.....	26
2.12.1 <i>Lipinski's Rule of Five</i>	26
2.12.2 Protein Data Bank	27
2.12.3 <i>Pubchem</i>	27
2.12.4 <i>BIOVIA Discovery Studio</i>	28
2.12.5 <i>PyRx</i>	28
2.12.6 <i>pkCSM</i>	29
2.13 Kerangka Teori.....	30
BAB 3 KERANGKA KONSEP.....	33

3.1 Kerangka Konsep	33
3.1.1. <i>NF-κB</i> Activation Pathway	33
3.1.2 Senyawa Aktif Daun Ramania (<i>Bouea macrophylla</i> Griff).....	34
BAB 4 METODE PENELITIAN	35
4.1 Rancangan Penelitian	35
4.2 Variabel Penelitian	35
4.2.1 Alat yang Digunakan.....	35
4.2.2 Bahan yang Digunakan	38
4.3 Alat dan Bahan yang Digunakan.....	41
4.3.1 Variabel Bebas	41
4.3.2 Variabel Terikat.....	41
4.4 Definisi Operasional.....	42
4.5 Tempat Dan Waktu Penelitian	43
4.6 Prosedur Penelitian.....	43
4.6.1 Persiapan Ligan	43
4.6.2 Persiapan Reseptor	44
4.6.3 Validasi Metode <i>Docking</i>	45
4.6.4 Penambatan Molekul dengan Aplikasi <i>PyRx</i>	46
4.6.5 Visualisasi Hasil <i>Docking</i>	47
4.6.6 Tahap Pelaporan	48
BAB 5 HASIL PENELITIAN	49
5.1 Data Penelitian	49
5.1.1 Hasil Uji Lipinski's Rule of Five	49
5.1.2 Hasil Uji Toksisitas Senyawa Aktif <i>Bouea macrophylla</i> Griff.....	51
5.1.3 Hasil Uji Farmakokinetik	53
5.1.4 Hasil <i>Molecular Docking</i>	55
5.2 Analisis dan Hasil Penelitian	63
5.2.1 Hasil Uji <i>Lipinski's Rule of Five</i>	63
5.2.2 Hasil Uji Toksisitas	64
5.2.3 Hasil Uji Farmakokinetika	65
5.2.4 Hasil <i>Molecular Docking</i>	67
BAB 6 PEMBAHASAN	69

6.1 Uji Drug-Likeness	69
6.2 Uji Toksisitas Senyawa Aktif Ekstrak Daun Ramania	71
6.3. Uji Farmakokinetika Senyawa Aktif Ekstrak Daun Ramania.....	72
6.4 Hasil Molcular <i>Docking</i>	74
BAB 7 PENUTUP.....	79
7.1 Kesimpulan	79
7.2 Saran.....	79
DAFTAR PUSTAKA	81
LAMPIRAN.....	90

DAFTAR SINGKATAN

ADME	: <i>Absorption, Distribution, Metabolism, Excretion</i>
AMD	: <i>Advanced Micro Device</i>
DAMP	: <i>Damage Associated Molecules Pattern</i>
DDR	: <i>Double Date Rate</i>
DNA	: <i>deoxyribonucleic acid</i>
EGF	: <i>Epidermal Growth Factor</i>
ERK	: <i>Extracellular Signal-Regulated Kinase</i>
HIA	: <i>Human Intestinal Absorption</i>
IGF-1	: <i>Insulin-like Growth Factor-1</i>
IL-1	: <i>Interleukin-1</i>
iNOS	: <i>inducible Nitric Oxide Synthase</i>
JNK	: <i>c-Jun N-terminal kinases</i>
LPS	: <i>Lipopolisakarida</i>
MAPK	: <i>Mitogen-Activated Protein Kinase</i>
MR	: <i>Molar Refractivity</i>
MyD88	: <i>Myeloid Differentiation Factor</i>
NF- κ B	: <i>Nuclear Factor-kappa B</i>
NMR	: <i>Nuclear Magnetic Resonance</i>
NO	: <i>Nitric oxide</i>
PAMP	: <i>Pathogen Spesific Associated Molecules Pattern</i>
PDB	: <i>Protein Data Bank</i>
PDGF	: <i>Platelet Derived Growth Factor</i>
pH	: <i>Power of Hydrogen</i>
RAM	: <i>Random-Access Memory</i>
ROS	: <i>Reactive Oxygen Species</i>
TGF- β	: <i>Transforming Growth Factor-β</i>
TLR	: <i>Toll Like Receptors</i>
TLR4	: <i>Toll Like Receptors-4</i>

TPA : *Topological Polar Surface Area*
VDss : *Volume Distribution at Steady State*
VEGF : *Vascular Endothelial Growth Factor*

DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
2.1. Identitas Inhibitor <i>Artemin</i>	24
4.1 Senyawa Aktif Ekstrak Daun Ramania dan Inhibitor.....	38
4.2 Tabel Senyawa Aktif Ekstrak Daun Ramania 3D.....	38
4.3 Keterangan Struktur Protein 3D <i>NF-κB</i>	41
4.4 Definisi Operasional.....	42
5.1 Hasil Uji <i>Lipinski's Rule of Five</i> menggunakan perangkat lunak berbasis web pkCSM.....	59
5.2 Hasil prediksi toksisitas senyawa aktif daun ramania (<i>Bouea macrophylla</i> Griff) menggunakan perangkat lunak berbasis web pkCSM.....	51
5.3 Hasil analisis farmakokinetika senyawa aktif daun ramania (<i>Bouea macrophylla</i> Griff) menggunakan perangkat lunak berbasis web pkCSM.....	53
5.4 Hasil <i>Docking NF-κB</i> dengan Senyawa Aktif Ekstrak Daun Ramania (<i>Bouea macrophylla</i> Griff) dan <i>Artemin</i>	55

DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
2.1 Pohon Ramania.....	13
2.2 Hasil Uji GC-MS Ekstrak Ramania.....	15
2.3 Grafik Molecular <i>Docking</i>	18
2.4 Struktur 3d <i>Artemin</i>	23
2.5 Kerangka Teori Studi In silico Antiinflamasi Senyawa Aktif Ekstrak Daun Ramania.....	30
3.1 Kerangka Konsep Studi In silico Antiinflamasi Senyawa Aktif Ekstrak Ramania.....	32
4.1 Tampilan Website PDB.....	36
4.2 Tampilan Website Pubchem.....	36
4.3 Aplikasi <i>PyRx</i>	36
4.4 Aplikasi <i>Biovia Discovery Studio</i>	37
4.5 Tampilan Website <i>pkCSM</i>	37
4.6 Tampilan Website <i>Protox Online Tool</i>	37
4.7 Struktur 3D <i>NF-κB</i>	39
5.1 a.Struktur 3D hasil <i>docking NF-κB</i> Dengan <i>Caryophyllene</i> . b. Struktur 2D hasil <i>docking NF-κB</i> dengan <i>Caryophyllene</i>	54
5.2 a.Struktur 3D hasil <i>docking NF-κB</i> Dengan <i>Humulene</i> . b. Struktur 2D hasil <i>docking NF-κB</i> dengan <i>Humulene</i>	55
5.3 a.Struktur 3D hasil <i>docking NF-κB</i> Dengan <i>2-Methyl - cis - 7,8-epoxynonadecane</i> . b. Struktur 2D hasil <i>docking NF-κB</i> dengan <i>2-Methyl-cis-7,8-epoxynonadecane</i>	55
5.4 a.Struktur 3D hasil <i>docking NF-κB</i> Dengan <i>Hexadecanoic acid, ethyl ester (Ethyl Palmitate)</i> . b. Struktur 2D hasil <i>docking NF-κB</i> dengan <i>Hexadecanoic acid, ethyl ester (Ethyl Palmitate)</i>	55
5.5 a.Struktur 3D hasil <i>docking NF-κB</i> Dengan <i>Phytol</i> . b. Struktur 2D hasil <i>docking NF-κB</i> dengan <i>Phytol</i>	56
5.6 a.Struktur 3D hasil <i>docking NF-κB</i> Dengan <i>Squalene</i> . b. Struktur 2D hasil <i>docking</i>	56
5.7 a.Struktur 3D hasil <i>docking NF-κB</i> Dengan <i>Vitamin E</i> . b. Struktur 2D hasil <i>docking NF-κB</i> dengan <i>Vitamin E</i>	56
5.8 a.Struktur 3D hasil <i>docking NF-κB</i> Dengan <i>Retinol Acetate</i> . b. Struktur 2D hasil <i>docking NF-κB</i> dengan <i>Retinol Acetate</i>	57
5.9 a.Struktur 3D hasil <i>docking NF-κB</i> Dengan <i>γ-himachalene</i> . b. Struktur 2D hasil <i>docking NF-κB</i> dengan <i>γ-himachalene</i>	57
5.10 a.Struktur 3D hasil <i>docking NF-κB</i> Dengan <i>Oxiraneundecanoic acid, 3-pentyl-, methyl ester, trans-(Methyl ricinoleate)</i> . b. Struktur 2D hasil <i>docking</i>	

<i>NF-κB</i> dengan <i>Oxiraneundecanoic acid, 3-pentyl-, methyl ester, trans-</i> <i>(Methyl ricinoleate)</i>	57
5.11 a.Struktur 3D hasil <i>docking NF-κB</i> Dengan <i>Artemin</i> . b. Struktur 2D hasil <i>docking NF-κB</i> dengan <i>Artemin</i>	57

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran

1. Jadwal Kegiatan Penelitian
2. Rincian Biaya Penelitian
3. Dokumentasi Proses Pengerjaan Skripsi
4. Dokumentasi ADMET
5. Hasil *Molecular Docking*