

**STUDI IN SILICO PROTEIN-PROTEIN INTERACTION
NETWORK SENYAWA AKTIF AKAR PECUT KUDA
(*Stachytarpheta jamaicensis* L.) DENGAN PROTEIN-PROTEIN
TARGET INFLAMASI**

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

Diajukan Oleh
Hilmi Wira Pranata Saragih
211111210022



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

Juli, 2025

**STUDI IN SILICO PROTEIN-PROTEIN INTERACTION
NETWORK SENYAWA AKTIF AKAR PECUT KUDA
(*Stachytarpheta jamaicensis* L.) DENGAN PROTEIN-PROTEIN
TARGET INFLAMASI**

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

Diajukan Oleh
Hilmi Wira Pranata Saragih
211111210022



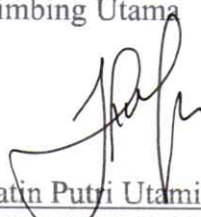
**UNIVERSITAS LAMBUNG MANGKURAT
FAKULTAS KEDOKTERAN GIGI
PROGRAM STUDI KEDOKTERAN GIGI
BANJARMASIN**

Juli, 2025

HALAMAN PERSETUJUAN UJIAN SKRIPSI

Skripsi oleh Hilmi Wira Pranata Saragih ini
Telah diperiksa dan disetujui untuk diseminarkan

Banjarmasin, 22 Juli 2025
Pembimbing Utama



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

Banjarmasin, 22 Juli 2025
Pembimbing Pendamping

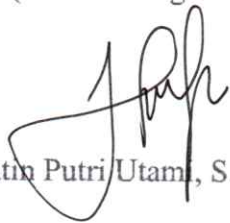


(drg. Muhammad Yanuar Ichrom Nahzi, Sp.KG)
NIP. 198612292014041001

HALAMAN PENETAPAN PANITIA PENGUJI SKRIPSI

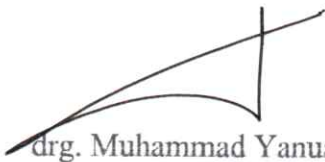
Skripsi oleh Hilmi Wira Pranata Saragih
Telah dipertahankan di depan dewan penguji
Pada tanggal 22 Juli 2025

Dewan Penguji
Ketua (Pembimbing Utama)



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

Anggota (Pembimbing Pendamping)



drg. Muhammad Yanuar Ichrom Nahzi, Sp.KG

Anggota



drg. Dewi Puspitasari, M. Si

Anggota



drg. Irnamanda D.H., M.Si., Sp. Ort

Skripsi

**STUDI IN SILICO PROTEIN-PROTEIN INTERACTION NETWORK
SENYAWA AKTIF AKAR PECUT KUDA (*Stachytarpheta jamaicensis* L.)
DENGAN PROTEIN-PROTEIN TARGET INFLAMASI**

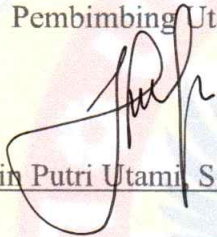
dipersiapkan dan disusun oleh

Hilmi Wira Pranata Saragih

telah dipertahankan di depan dewan penguji
pada tanggal **22 Juli 2025**

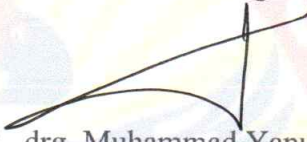
Susunan Dewan Penguji

Pembimbing Utama



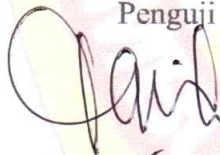
Juliyatin Putri Utami, S.Si., M. Biomed

Pembimbing Pendamping



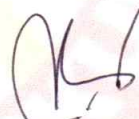
drg. Muhammad Yanuar Ichrom Nahzi,
Sp.KG

Penguji



drg. Dewi Puspitasari, M. Si

Penguji



drg. Iramanda D.H., M.Si., Sp. Ort

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, 22 Juli 2025



Hilmi Wira Pranata Saragih

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

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

Nama : Hilmi Wira Pranata Saragih
NIM : 2111111210022
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 PROTEIN-PROTEIN INTERACTION NETWORK SENYAWA AKTIF AKAR PECUT KUDA (*Stachytarpheta jamaicensis* L.) DENGAN PROTEIN-PROTEIN TARGET INFLAMASI”

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 : 22 Juli 2025

Yang menyatakan



Hilmi Wira Pranata Saragih

RINGKASAN

STUDI IN SILICO PROTEIN-PROTEIN INTERACTION NETWORK SENYAWA AKTIF AKAR PECUT KUDA (*Stachytarpheta jamaicensis* L.) DENGAN PROTEIN-PROTEIN TARGET INFLAMASI

Salah satu masalah kesehatan yang sering dialami tubuh manusia adalah inflamasi. Inflamasi terjadi karena adanya respon perlindungan normal terhadap cedera jaringan yang disebabkan oleh trauma fisik, bahan kimia berbahaya, atau agen mikrobiologi. Inflamasi juga dapat terjadi pada bagian tubuh manapun. Inflamasi atau peradangan merupakan respon jaringan terhadap reaksi tubuh yang dapat menimbulkan kerusakan sel. Proses inflamasi akan menyebabkan kerusakan jaringan yang ditandai dengan kemerahan, bengkak, panas, nyeri, dan hilangnya fungsi jaringan. Fisiologi penyembuhan luka secara umum akan melalui tiga proses penyembuhan luka yaitu fase inflamasi, fase proliferasi, dan fase maturasi/*remodelling*. Reaksi inflamasi melibatkan respons sel imun, pembuluh darah, dan molekul mediator. Mediator inflamasi yang paling berperan adalah vasoaktif amin (histamin dan serotonin), produk lipid (prostaglandin dan leukotrien), sitokin, dan faktor komplemen. Sitokin merupakan modulator utama pada peradangan, serta memiliki peran yang sangat penting untuk fungsi makrofag. Sitokin memediasi pelepasan respons imun yang efektif, menghubungkan imunitas bawaan dan adaptif, dan memengaruhi lingkungan mikro makrofag. Ketika makrofag terpapar rangsangan inflamasi, makrofag mengeluarkan sitokin seperti *tumor necrosis factor* (TNF), IL-1, IL-6, IL-8, dan IL-12. Saat ini, antioksidan alami yang terdapat dalam tanaman obat menunjukkan berbagai efek biologis. Salah satu tumbuhan obat yang dapat digunakan sebagai tanaman obat adalah tanaman pecut kuda (*Stachytarpheta jamaicensis* L.). Pecut kuda adalah tanaman liar dari keluarga Verbenaceae yang tumbuh di daerah tropis seperti Indonesia. Penduduk di Kalimantan telah menggunakan bunga dan akar pecut kuda sebagai obat tradisional untuk meredakan sakit tenggorokan dan batuk. Telah diteliti bahwa akar pecut kuda mengandung metabolit sekunder seperti flavonoid, fenol, saponin, alkaloid, tanin, glikosida, steroid, terpenoid, dan coumarin. Berdasarkan hasil uji LC-HRMS, kandungan yang terdeteksi sebagai puncak senyawa utama dari senyawa golongan coumarin yaitu *luvangetin* dan *xanthyletin*. *Luvangetin* dan *xanthyletin* memiliki sifat biologis yang sangat baik, yang dapat bertindak sebagai antiulcer, antioksidan, antiinflamasi, efek antibakteri, dan aktivitas antijamur. Protein merupakan molekul yang memiliki peranan penting dalam menjalankan fungsi sel suatu organisme. Untuk menjalankan fungsinya, protein seringkali berinteraksi dengan protein lain. *Protein-protein interaction* (PPI) adalah hubungan molekuler antara satu protein dengan protein lainnya yang terjadi di dalam sebuah sel dalam suatu organisme hidup. PPI dapat digunakan untuk mendefinisikan fungsi suatu protein dengan mengetahui posisi protein tersebut dalam sebuah jejaring PPI. Metode *in silico* digunakan sebagai gambaran interaksi yang terjadi antara senyawa dengan target molekuler, senyawa dengan reseptor maupun protein target.

Penelitian ini merupakan jenis penelitian eksperimental yang dilakukan dengan metode *in silico* menggunakan bantuan sistem komputer. Penelitian ini dilakukan dengan cara analisis untuk mengetahui PPIs (*protein-protein interaction network*) dari senyawa aktif akar pecut kuda dengan protein-protein target inflamasi. Data penelitian yang berupa struktur 2D dan 3D dari senyawa aktif akar pecut kuda yaitu *luvangetin* dan *xanthyletin* didapatkan dari situs *PubChem*. Selanjutnya aktivitas biologis dari senyawa aktif akar pecut kuda akan diprediksi dengan melibatkan protein-protein target inflamasi menggunakan beberapa *tools* seperti *PASS Online (Way2Drug)*, *PharmMapper*, *SwissTargetPrediction*, dan *Super-PRED*. Setelah didapatkan aktivitas biologisnya, hasil tersebut akan dianalisis menggunakan *tools STRING 11.0 database* untuk melihat hasil *mapping* prediksi antara senyawa aktif akar pecut kuda dengan protein-protein target inflamasi. Hasil penelitian menunjukkan terdapat banyak interaksi yang terjadi antara senyawa aktif pecut kuda dengan protein target inflamasi setelah dianalisis menggunakan *tools STRING 11.0 database*. Kesimpulan yang dapat ditarik dari penelitian ini adalah terdapat beberapa protein yang berperan dalam beberapa jalur antiinflamasi yaitu *HIF-1 signaling pathway*, *VEGF signaling pathway*, *Th17 cell differentiation*, dan *Adipocytokine signaling pathway*.

SUMMARY

IN SILICO STUDY OF PROTEIN-PROTEIN INTERACTION NETWORK OF ACTIVE COMPOUNDS ROOT OF (*Stachytarpheta jamaicensis* L.) WITH INFLAMMATION TARGET PROTEINS

*One of the health problems often experienced by the human body is inflammation. Inflammation occurs as a normal protective response to tissue injury caused by physical trauma, harmful chemicals, or microbiological agents. Inflammation can also occur in any part of the body. Inflammation is a tissue response to bodily reactions that can cause cell damage. The process of inflammation will lead to tissue damage characterized by redness, swelling, heat, pain, and loss of tissue function. The physiology of wound healing generally goes through three processes: the inflammatory phase, the proliferative phase, and the maturation/remodelling phase. The inflammatory reaction involves the response of immune cells, blood vessels, and mediator molecules. The most significant inflammatory mediators are vasoactive amines (histamine and serotonin), lipid products (prostaglandins and leukotrienes), cytokines, and complement factors. Cytokines are the main modulators of inflammation and play a crucial role in macrophage function. Cytokines mediate the release of an effective immune response, linking innate and adaptive immunity, and influencing the macrophage microenvironment. When macrophages are exposed to inflammatory stimuli, they release cytokines such as tumor necrosis factor (TNF), IL-1, IL-6, IL-8, and IL-12. Currently, natural antioxidants found in medicinal plants exhibit various biological effects. One of the medicinal plants that can be used as a medicinal herb is the horse whip plant (*Stachytarpheta jamaicensis* L.). The horse whip plant is a wild plant from the Verbenaceae family that grows in tropical areas such as Indonesia. The people of Kalimantan have used the flowers and roots of the horse whip plant as traditional medicine to relieve sore throats and coughs. It has been researched that the roots of the horse whip contain secondary metabolites such as flavonoids, phenols, saponins, alkaloids, tannins, glycosides, steroids, terpenoids, and coumarins. Based on the LC-HRMS test results, the detected compounds as the main peaks of the coumarin group are luvangetin and xanthyletin. Luvangetin and xanthyletin have very good biological properties, which can act as antiulcer, antioxidant, anti-inflammatory, antibacterial, and antifungal agents. Proteins are molecules that play an important role in carrying out the cellular functions of an organism. To perform its functions, proteins often interact with other proteins. Protein-protein interaction (PPI) is the molecular relationship between one protein and another that occurs within a cell in a living organism. PPI can be used to define the function of a protein by determining its position within a PPI network. The in silico method is used to illustrate the interactions that occur between compounds and target molecules, compounds and receptors, or target proteins.*

This research is a type of experimental study conducted using the in silico method with the aid of computer systems. This research was conducted through analysis to determine the PPIs (protein-protein interaction network) of the active compounds of the horse whip root with target inflammatory proteins. The research data in the form of 2D and 3D structures of the active compounds from the horse whip root, namely luvangetin and xanthyletin, were obtained from the PubChem website. Next, the biological activity of the active compounds from the horse whip root will be predicted by involving inflammatory target proteins using several tools such as PASS Online (Way2Drug), PharmMapper, SwissTargetPrediction, and Super-PRED. After obtaining the biological activity, the results will be analyzed using the STRING 11.0 database tools to see the mapping results between the active compounds of the horse whip root and the inflammatory target proteins. The research results show that there are many interactions between the active compounds of the horse whip plant and inflammatory target proteins after being analyzed using the STRING 11.0 database tools. The conclusion that can be drawn from this study is that there are several proteins involved in various anti-inflammatory pathways, namely the HIF-1 signaling pathway, VEGF signaling pathway, Th17 cell differentiation, and Adipocytokine signaling pathway.

ABSTRAK

STUDI IN SILICO PROTEIN-PROTEIN INTERACTION NETWORK SENYAWA AKTIF AKAR PECUT KUDA (*Stachytarpheta jamaicensis* L.) DENGAN PROTEIN-PROTEIN TARGET INFLAMASI

**Hilmi Wira Pranata Saragih, Juliyatin Putri Utami, Muhammad Yanuar
Ichrom Nahzi**

Latar Belakang: Salah satu tumbuhan yang dapat digunakan sebagai tanaman obat adalah pecut kuda (*Stachytarpheta jamaicensis* L.). Pecut kuda mengandung metabolit sekunder seperti flavonoid, fenol, saponin, alkaloid, tanin, glikosida, steroid, terpenoid, dan coumarin, yang dapat ditemukan di beberapa bagian seperti daun, bunga, serta akar. *Luvangetin* dan *xanthyletin* merupakan puncak senyawa utama dari senyawa golongan coumarin yang memiliki sifat biologis yang sangat baik, yang dapat bertindak sebagai antiulcer, antioksidan, antiinflamasi, efek antibakteri, dan aktivitas antijamur. **Tujuan:** Mengetahui target mekanisme aktif, PPIs (*protein-protein interaction network*), dan *network model of protein interaction* senyawa aktif akar pecut kuda dengan protein-protein target inflamasi. **Metode:** Penelitian ini menggunakan metode *in silico* dengan bantuan sistem komputer. Analisis dilakukan untuk mengetahui PPIs (*protein-protein interaction network*) dari senyawa aktif akar pecut kuda (*Stachytarpheta jamaicensis* L.) dengan protein-protein target inflamasi. Aktivitas biologis dari senyawa aktif akar pecut kuda dianalisis menggunakan *tools PASS Online (Way2Drug)*, *PharmMapper*, *SwissTargetPrediction*, dan *Super-PRED*. Setelah didapatkan aktivitas biologisnya, hasilnya akan dianalisis menggunakan *tools STRING 11.0 database* untuk melihat hasil *mapping* prediksi antara senyawa aktif akar pecut kuda dengan protein-protein target inflamasi. **Hasil:** Berdasarkan hasil analisis didapatkan beberapa interaksi yang paling kuat dari senyawa aktif akar pecut kuda dengan protein target inflamasi yaitu *HIF-1 signaling pathway*, *VEGF signaling pathway*, *Th17 cell differentiation*, dan *Adipocytokine signaling pathway*.

Kata kunci: antiinflamasi, pecut kuda, *luvangetin*, *xanthyletin*, *in silico*

ABSTRACT

IN SILICO STUDY OF PROTEIN-PROTEIN INTERACTION NETWORK OF ACTIVE COMPOUNDS ROOT OF (*Stachytarpheta jamaicensis* L.) WITH INFLAMMATION TARGET PROTEINS

Hilmi Wira Pranata Saragih, Juliyatin Putri Utami, Muhammad Yanuar Ichrom Nahzi

Background: One of the wild plants that can be used as medicine is horsewhip. (*Stachytarpheta jamaicensis* L.). Secondary metabolites such as flavonoids, phenols, saponins, alkaloids, tannins, glycosides, steroids, terpenoids, and coumarins are found in various parts of the horsewhip plant, including the leaves, stems, and roots. Luvangetin and xanthyletin, two main compounds in the coumarin group, possess excellent biological properties as anti-ulcer, antioxidant, anti-inflammatory, antibacterial, and antifungal agents. **Objective:** To determine the active target mechanism, protein-protein interaction (PPI) network, and protein interaction network model of active compounds root from the horsewhip plant (*Stachytarpheta jamaicensis* L.) with target inflammatory proteins. **Method:** Conducted through in silico methods with the support of computer systems. The analysis aims to identify PPIs (protein-protein interaction networks) of the active compounds root in horsewhip that are related to target inflammatory proteins. Tools such as PASS Online (Way2Drug), PharmMapper, SwissTargetPrediction, and Super-PRED are used to observe its biological activity. After obtaining the biological activity, the prediction mapping results between the active horsewhip compound and the target inflammatory proteins will be examined using the STRING 11.0 database tools. **Results:** Based on the analysis, the strongest interactions of horsewhip root active compounds with inflammatory target proteins are HIF-1 signaling pathway, VEGF signaling pathway, Th17 cell differentiation, and Adipocytokine signaling pathway.

Keywords: antiinflammatory, horsewhip, luvangetin, xanthyletin, in silico

KATA PENGANTAR

Puji syukur ke hadirat Allah SWT yang telah memberikan rahmat-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul **“STUDI IN SILICO PROTEIN-PROTEIN INTERACTION NETWORK SENYAWA AKTIF AKAR PECUT KUDA (*Stachytarpheta jamaicensis* L.) DENGAN PROTEIN-PROTEIN TARGET INFLAMASI”**, 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.

Wakil Dekan Fakultas Kedokteran Gigi Bidang Akademik, drg. Isnur Hatta, MAP., Wakil Dekan Fakultas Kedokteran Gigi Bidang Keuangan dan Umum, drg. I Wayan Arya Krishnawan Firdaus, M. Kes., dan Wakil Dekan Fakultas Kedokteran Gigi Bidang Kemahasiswaan dan Alumni, drg. Deby Kania Tri Putri, M. Kes yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.

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

Kedua dosen pembimbing, Juliyatin Putri Utami, S.Si., M. Biomed. dan drg. Muhammad Yanuar Ichrom Nahzi, Sp.KG yang berkenan memberikan saran serta arahan dalam penyelesaian skripsi ini.

Kedua dosen penguji, drg. Dewi Puspitasari, M. Si dan drg. Irnamanda D.H., M.Si., Sp. Ort 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.

Kepada Ibu Sulastri, tak henti-hentinya penulis bersyukur dan mengucapkan terima kasih banyak atas berkat, doa, dukungan, serta pengorbanan yang telah dilakukan agar penulis bisa mencapai titik ini.

Kepada Kakak Givanni Bulan Alfridha Saragih dan Anggita Gayatri Saragih, serta Adik Aisyah Putri Jasmine dan Alfiyah Afsheena Nuryani, penulis juga mengucapkan terima kasih banyak atas 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 kebersamai 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.

Terakhir, kepada Dinda Ayu Febrianti penulis mengucapkan terima kasih atas doa, dukungan, serta segala kontribusi yang telah diberikan kepada penulis. Terima kasih juga karena telah kebersamai dan menjadi bagian dalam proses perjalanan ini.

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, 22 Juli 2025



Penulis

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN SAMPUL	ii
HALAMAN PERSETUJUAN UJIAN SKRIPSI	iii
HALAMAN PENETAPAN PANITIA PENGUJI SKRIPSI	iv
HALAMAN PENGESAHAN	v
HALAMAN PERNYATAAN ORIGINALITAS	vi
HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI	vii
RINGKASAN	viii
SUMMARY	x
ABSTRAK	xii
ABSTRACT	xiii
KATA PENGANTAR	xiv
DAFTAR ISI	xvi
DAFTAR SINGKATAN	xix
DAFTAR TABEL	xxii
DAFTAR GAMBAR	xxiii
DAFTAR LAMPIRAN	xxiv
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Masalah	1
1.2 Rumusan Masalah.....	5
1.3 Tujuan Penelitian	5
1.3.1 Tujuan Umum	5
1.3.2 Tujuan Khusus	5
1.4 Manfaat Penelitian	6
1.4.1 Manfaat Teoritis	6
1.4.2 Manfaat Klinis	6
1.4.3 Manfaat Bagi Masyarakat.....	6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	7

2.1	Inflamasi	7
2.1.1	Definisi Inflamasi	7
2.1.2	Gejala Inflamasi.....	8
2.1.3	Mediator Inflamasi	9
2.1.4	Mekanisme Inflamasi	12
2.1.5	Protein-Protein Target Inflamasi.....	16
2.2	Pecut Kuda (<i>Stachytarpheta jamaicensis</i> L.)	21
2.2.1	Klasifikasi Pecut Kuda (<i>Stachytarpheta jamaicensis</i> L.)	21
2.2.2	Senyawa Aktif Akar Pecut Kuda (<i>Stachytarpheta jamaicensis</i> L.)	23
2.2.2.1	<i>Luvangetin</i>	24
2.2.2.2	<i>Xanthyletin</i>	24
2.3	PPI (<i>Protein-Protein Interaction</i>).....	25
2.4	Tools PPI (<i>Protein-Protein Interaction</i>)	27
2.4.1	<i>PASS Online (Way2Drug)</i>	27
2.4.2	<i>PharmMapper</i>	27
2.4.3	<i>SwissTargetPrediction</i>	27
2.4.4	<i>Super-PRED</i>	28
2.4.5	<i>STRING 11.0 database</i>	28
2.5	Kerangka Teori	30
2.5.1	Penjelasan Kerangka Teori	31
BAB III KERANGKA KONSEP		33
3.1	Kerangka Konsep.....	33
3.1.1	Penjelasan Kerangka Konsep	33
BAB IV METODE PENELITIAN		35
4.1	Rancangan Penelitian.....	35
4.2	Variabel Penelitian	35
4.2.1	Variabel Bebas	35
4.2.2	Variabel Terikat.....	35
4.2.3	Variabel Terkendali	36
4.3	Definisi Operasional	36

4.4 Bahan Penelitian	37
4.5 Alat Penelitian	38
4.5.1 Perangkat Keras	38
4.5.2 Perangkat Lunak	38
4.6 Tempat dan Waktu Penelitian	41
4.6.1 Tempat Penelitian	41
4.6.2 Waktu Penelitian	41
4.7 Prosedur Penelitian	41
4.8 Alur Uji <i>In Silico</i>	46
4.9 Prosedur Pengambilan dan Pengumpulan Data	46
4.10 Cara Pengolahan dan Analisis Data	47
BAB V HASIL PENELITIAN	48
5.1 Data Penelitian	48
5.2 Analisis dan Hasil Penelitian	50
BAB VI PEMBAHASAN.....	57
BAB VII PENUTUP.....	61
7.1 Kesimpulan	61
7.2 Saran	62
DAFTAR PUSTAKA	63
LAMPIRAN.....	68

DAFTAR SINGKATAN

2D	: Dua Dimensi
3D	: Tiga Dimensi
Akt	: <i>Protein Kinase B</i>
ACACB	: <i>Acetyl-CoA Carboxylase Beta</i>
AMPK	: <i>Adenosine Monophosphate-Activated Protein Kinase</i>
ATP	: <i>Adenosine tripdosphate</i>
CAP	: <i>carboxyalkylpyrrole</i>
CFU-GM	: <i>Colony Forming Unit-Granulocyte-Macrophage</i>
CHUK	: <i>Conserved Helix-Loop-Helix Ubiquitous Kinase</i>
COX	: <i>Cyclooxygenase</i>
CREBBP	: <i>CREB Binding Protein</i>
CSF-1	: <i>Colony stimulating factor-1</i>
CTRP3	: <i>C1q/TNF-Related Protein 3</i>
EGF	: <i>Epithelial Growth Factor</i>
FGF	: <i>Fibroblast Growth Factor</i>
Foxp3	: <i>Forkhead box protein P3</i>
GM-CSF	: <i>Granulocytemacrophage Colony-Stimulating Factor</i>
GPx	: <i>glutathione peroxidase</i>
GR	: <i>glutathione reduktase</i>
GSH	: <i>glutathione reduced</i>
GST	: <i>glutathione-Stransferase</i>
HIF-1	: <i>Hypoxia-Inducible Factor-1</i>
HK2	: <i>Hexokinase 2</i>
HSC	: <i>Haematopoietic Stem Cell</i>
HSP90AB1	: <i>Heat Shock Protein 90 Alpha Family Class B Member 1</i>
IBD	: <i>inflammatory bowel disease</i>

iNOS	: <i>Inducible Nitric Oxide Synthase</i>
IL-1	: <i>Interleukin-1</i>
IL-6	: <i>Interleukin-6</i>
IL-8	: <i>Interleukin-8</i>
IL-17	: <i>Interleukin-17</i>
IL-33	: <i>Interleukin-33</i>
IL23R	: <i>Interleukin 23 Receptor</i>
IL-1Ra	: <i>(IL-1 receptor antagonist)</i>
IFN- γ	: <i>Interferon γ</i>
KDR	: <i>Kinase Insert Domain Receptor</i>
LC-HRMS	: <i>Liquid Chromatography-High Resolution Mass Spectrometry</i>
LDHAL6A	: <i>Lactate Dehydrogenase A-Like 6A</i>
MAPK/ERK	: <i>Mitogen-Activated Protein Kinase/Extracellular Signal-Regulated Kinase</i>
MAPK14	: <i>Mitogen-Activated Protein Kinase 14</i>
MAPKAPK2	: <i>MAP Kinase-Activated Protein Kinase 2</i>
MAP2K2	: <i>Mitogen-Activated Protein Kinase Kinase 2</i>
MCP	: <i>Monocyte Chemoattractant Protein</i>
mTOR	: <i>mammalian Target of Rapamycin</i>
NF- κ B	: <i>Nuclear Factor Kappa-light-chain-enhancer of Activated B Cells</i>
NFKB1	: <i>Nuclear Factor Kappa B Subunit 1</i>
NO	: <i>Nitric Oxidase</i>
NOX	: <i>NADPH oxidase</i>
OPG	: <i>Osteoprotegerin</i>
PASS	: <i>Prediction of Activity Spectra for Substances</i>
PDGF	: <i>Platelet Derived Growth Factor</i>
PI3K	: <i>Phosphoinositide 3-Kinase</i>
PPI	: <i>Protein-Protein Interaction</i>

PRKCA	: <i>Protein Kinase C Alfa</i>
PTPN11	: <i>Protein Tyrosine Phosphatase Non-Receptor Type 11</i>
RANTES	: <i>Regulated upon Activation Normal T cell Expressed and Secreted</i>
ROR γ t	: <i>Retinoic Acid Receptor-Related Orphan Receptor Gamma t</i>
ROS	: <i>Reactive Oxygen Species</i>
SFRP5	: <i>Secreted Frizzled-Related Protein 5</i>
siRNA	: <i>Small Interfering RNA</i>
SLC2A1	: <i>Solute Carrier Family 2 Member 1</i>
SOD	: <i>Superoxide Dismutase</i>
SRC	: <i>Proto-oncogene tyrosine-protein kinase Src</i>
STAT3	: <i>Signal Transducer and Activator of Transcription 3</i>
TLR	: <i>Toll-like receptor</i>
TNF- α	: <i>Tumor Necrosis Factor-α</i>
TGF- β	: <i>Transforming Growth Factor-β</i>
VEGF	: <i>Vascular Endothelial Growth Factor</i>
VEGFR-2	: <i>Vascular Endothelial Growth Factor Receptor 2</i>
WHO	: <i>World Health Organization</i>
Wnt5a/JNK	: <i>Ligan Non-Canonical Wnt/c-Jun N-terminal Kinase</i>
ZAP70	: <i>Zeta-chain-associated protein kinase 70</i>

DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
4.1 Definisi Operasional.....	38
4.2 Senyawa Aktif Tanaman Pecut Kuda (<i>Stachytarpheta jamaicensis</i>).....	39
5.1 Hasil <i>Mapping</i> Senyawa Aktif <i>Luvangetin</i> dengan Protein Target Inflamasi Menggunakan <i>Tools Phammapper</i>	50
5.2 Hasil <i>Mapping</i> Senyawa Aktif <i>Luvangetin</i> dengan Protein Target Inflamasi Menggunakan <i>Tools SwissTargetPrediction</i>	51
5.3 Hasil <i>Mapping</i> Senyawa Aktif <i>Luvangetin</i> dengan Protein Target Inflamasi Menggunakan <i>Tools Super-PRED</i>	53
5.4 Hasil <i>Mapping</i> Senyawa Aktif <i>Xanthyletin</i> dengan Protein Target Inflamasi Menggunakan <i>Tools PharmMapper</i>	54
5.5 Hasil <i>Mapping</i> Senyawa Aktif <i>Xanthyletin</i> dengan Protein Target Inflamasi Menggunakan <i>Tools SwissTargetPrediction</i>	54
5.6 Hasil <i>Mapping</i> Senyawa Aktif <i>Xanthyletin</i> dengan Protein Target Inflamasi Menggunakan <i>Tools Super-PRED</i>	55

DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
2.1 Tahapan yang Terlibat dalam Penyembuhan Luka.....	13
2.2 (a) Pecut Kuda Ungu; (b) Daun dan Bunga Pecut Kuda.....	24
2.3 Struktur 2D dan 3D <i>Luvangetin</i>	25
2.4 Struktur 2D dan 3D <i>Xanthyletin</i>	26
2.5 Kerangka Teori Studi <i>In Silico Protein-Protein Interaction Network</i> Senyawa Aktif Akar Pecut Kuda (<i>Stachytarpheta jamaicensis</i> L.) dengan Protein-Protein Target Inflamasi	32
3.1 Kerangka Konsep Studi <i>In Silico Protein-Protein Interaction Network</i> Senyawa Aktif Akar Pecut Kuda (<i>Stachytarpheta jamaicensis</i> L.) dengan Protein-Protein Target Inflamasi	35
4.1 Situs <i>PubChem</i>	40
4.2 <i>Tools PASS Online (Way2Drug)</i>	41
4.3 <i>Tools PharmMapper</i>	41
4.4 <i>Tools SwissTargetPrediction</i>	42
4.5 <i>Tools Super-PRED</i>	42
4.6 <i>Tools STRING 11.0 database</i>	43
4.7 Contoh Hasil Mapping Senyawa Aktif dengan Protein-Protein Target.....	56
4.8 Alur Penelitian Studi <i>In Silico Protein-Protein Interaction Network</i> Senyawa Aktif Akar Pecut Kuda (<i>Stachytarpheta jamaicensis</i> L.) dengan Protein-Protein Target Inflamasi	57
5.1 Struktur 3D <i>Luvangetin</i>	72
5.2 Struktur 3D <i>Xanthyletin</i>	72
5.3 Hasil <i>Mapping Luvangetin/Xanthyletin</i> Menggunakan <i>Tools STRING 11.0 Database</i>	73

DAFTAR LAMPIRAN

- Lampiran 1. Prosedur Penggunaan *Tools* Penelitian
- Lampiran 2. Hasil Skrining Penelitian
- Lampiran 3. Dokumentasi Kegiatan Penelitian