



**UJI POTENSI SENYAWA AKTIF DAUN SERAI
(*Cymbopogon citratus*) SEBAGAI ANTIINFLAMASI
DENGAN AKTIVASI COX-1 DAN INHIBISI COX-2
SECARA *IN SILICO***

SKRIPSI

**Untuk Memenuhi Persyaratan
Memperoleh Gelar Sarjana Kedokteran**



Oleh

MOHAMMAD YUSUF ABDILLAH

21801101110

PROGRAM STUDI KEDOKTERAN

FAKULTAS KEDOKTERAN

UNIVERSITAS ISLAM MALANG

2023



**UJI POTENSI SENYAWA AKTIF DAUN SERAI
(*Cymbopogon citratus*) SEBAGAI ANTIINFLAMASI
DENGAN AKTIVASI COX-1 DAN INHIBISI COX-2
SECARA *IN SILICO***

SKRIPSI

**Untuk Memenuhi Persyaratan
Memperoleh Gelar Sarjana Kedokteran**



Oleh

**MOHAMMAD YUSUF ABDILLAH
21801101110**

**PROGRAM STUDI SARJANA KEDOKTERAN
FAKULTAS KEDOKTERAN
UNIVERSITAS ISLAM MALANG**

2023

KATA PENGANTAR

Dengan puji syukur ke hadirat Allah SWT atau Tuhan Yang Maha Esa, atas kelimpahan rahmat dan hidayah-Nya penulis dapat menyelesaikan proposal kelayakan yang berjudul: “Uji Potensi Senyawa Aktif Daun Serai (*Cymbopogon Citratus*) Sebagai Antiinflamasi Dengan Aktivasi Cox-1 Dan Inhibisi Cox-2 Secara In Silico”.

Dengan selesainya proposal ini penulis menyampaikan ucapan terima kasih sebesar-besarnya kepada Dian Novita W S.Farm M.Imun, dr. Yeni Amalia Sp.A M.Kes dan segenap pihak yang telah banyak membantu yang tidak dapat sebutkan satu persatu.

Sangat disadari bagi penulis terdapat banyak kekurangan dalam penulisan ini, oleh karena itu sangat mengharapkan saran dan masukan yang membangun untuk menyempurnakan serta bermanfaat bagi yang membutuhkan.

Malang, 20 Februari 2023

Penulis.

Mohammad Yusuf Abdillah

21801101110



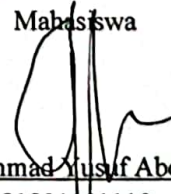
PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI

Saya menyatakan dengan sebenar-benarnya bahwa sepanjang pengetahuan saya, di dalam Naskah SKRIPSI ini tidak terdapat karya ilmiah yang pernah diajukan oleh orang lain untuk memperoleh gelar akademik di suatu perguruan tinggi, dan tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain kecuali yang secara tertulis dikutip dalam naskah ini dan disebutkan dalam sumber kutipan dan daftar pustaka.

Apabila ternyata di dalam SKRIPSI ini dapat dibuktikan terdapat unsur-unsur plagiasi, saya bersedia SKRIPSI ini digugurkan dan gelar akademik yang telah saya peroleh (SARJANA KEDOKTERAN) dibatalkan, serta diproses sesuai dengan peraturan perundang-undangan yang berlaku (UU No.20 Tahun 2003, Pasal 25 ayat 7 dan Pasal 70).

Malang, 20 Februari 2023

Mahasiswa



Mohammad Yusuf Abdillah

21801101110



SKRIPSI

UJI POTENSI SENYAWA AKTIF DAUN SERAI (*Cymbopogon citratus*) SEBAGAI ANTIINFLAMASI DENGAN AKTIVASI COX-1 DAN INHIBISI COX-2 SECARA *IN SILICO*

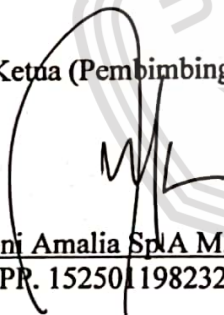
Oleh
MOHAMMAD YUSUF ABDILLAH
21801101110


Telah Dipertahankan Di Depan Penguji
Pada Tanggal 20 Februari 2023
Dan Dinyatakan Memenuhi Syarat

Menyetujui,
Komisi Pembimbing,

Ketua (Pembimbing I)

Anggota (Pembimbing II)


dr. Yeni Amalia Sp.A M.Biomed
NPP. 152501198232228


Dian Novita W. S.Farm., M.Imun.
NPP. 191711199132237

Malang, 20 Februari 2023
Program Studi Sarjana Kedokteran
Fakultas Kedokteran Universitas Islam Malang



dr. Rahma Lufiana, M.Kes., Ph.D
NPP. 205.02.00001

RINGKASAN

Mohammad Yusuf Abdillah. Fakultas Kedokteran, Universitas Islam Malang, 11 Agustus, 2022. Uji Potensi Senyawa Aktif Daun Serai (*Cymbopogon Citratus*) Sebagai Antiinflamasi Dengan Aktivasi Cox-1 Dan Inhibisi Cox-2 Secara In Silico. Pembimbing 1: Yeni Amalia 2: Dian Novita Wulandari*

Pendahuluan: Daun serai (*Cymbopogon citratus*) mengandung berbagai senyawa aktif yang berpotensi sebagai antiinflamasi khususnya mengurangi rasa nyeri, demam dan perlindungan saluran cerna. Penelitian ini bertujuan untuk memprediksi potensi senyawa aktif daun serai sebagai antiinflamasi dengan mekanisme aktivasi COX-1 dan penghambatan COX-2 secara in silico.

Metode: Metode penelitian menggunakan penambatan molekul untuk menilai afinitas senyawa aktif daun serai terhadap protein COX-1 dan COX-2 diukur menggunakan autodock vina 1.5.6 dengan parameter energi ikatan bebas dan residu asam amino, yang divisualisasikan menggunakan Biovia Studio. Adapun penelitian ini menilai uji farmakokinetik menggunakan website pkcsm *online tools* dengan melihat nilai ADMET (absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, toksisitas). Analisa data dilakukan secara diskriptif analitik dan validasi penambatan molekul berdasarkan Root Mean Square Deviation.

Hasil: Senyawa aktif memiliki afinitas yang rendah terhadap COX-1 antara lain geraniol (ΔG -3,6 kkal/mol) dengan persamaan residu asam amino 0%; terpinol (ΔG -3,9 kkal/mol) dengan persamaan residu asam amino 0%; trans-citral (ΔG -4,0 kkal/mol) dengan persamaan residu asam amino 0%. Senyawa aktif yang memiliki afinitas yang tinggi terhadap COX-2 antara lain Isoorientin (ΔG -11 kkal/mol) dengan persamaan residu asam amino 42%; Luteolin (ΔG -9,6 kkal/mol) dengan persamaan residu asam amino 72%; Quercetin (ΔG -9,5 kkal/mol) dengan persamaan residu asam amino 42%. Setiap senyawa aktif yang diujikan memiliki kesamaan residu asam amino dengan kontrol obat. Hasil sifat farmakokinetik didapatkan semua senyawa aktif memiliki nilai absorpsi diatas 30%, tidak dapat menembus sawar otak, nilai VDss baik kecuali caffeic acid, CYP inhibitor tidak ditemukan, nilai total clearance antara 0,3 sampai 1,2 dan tidak bersifat toksik.

Kesimpulan: Senyawa aktif daun serai mempunyai efek antiinflamasi dengan mengaktivasi COX-1 dan menghambat COX-2 yang dibuktikan dengan kesamaan asam amino dengan kontrol obat.. Uji Farmakokinetik didapatkan senyawa aktif daun serai baik untuk dikonsumsi secara oral dan tidak mengakibatkan hepatotoksik.

Kata Kunci : Antiinflamasi; *Cymbopogon citratus*; *in silico*

SUMMARY

Mohammad Yusuf Abdillah. Faculty of Medicine, Islamic University of Malang, 11 Agustus, 2022. In Silico Study: Potential Active Compound Of Lemon Grass Leaf (*Cymbopogon Citratus*) As Herbal Antiinflamasi Drug With Mechanism activation COX-1 and inhibit COX-2. Advisor 1: Yeni Amalia Advisor 2: Dian Novita Wulandari*

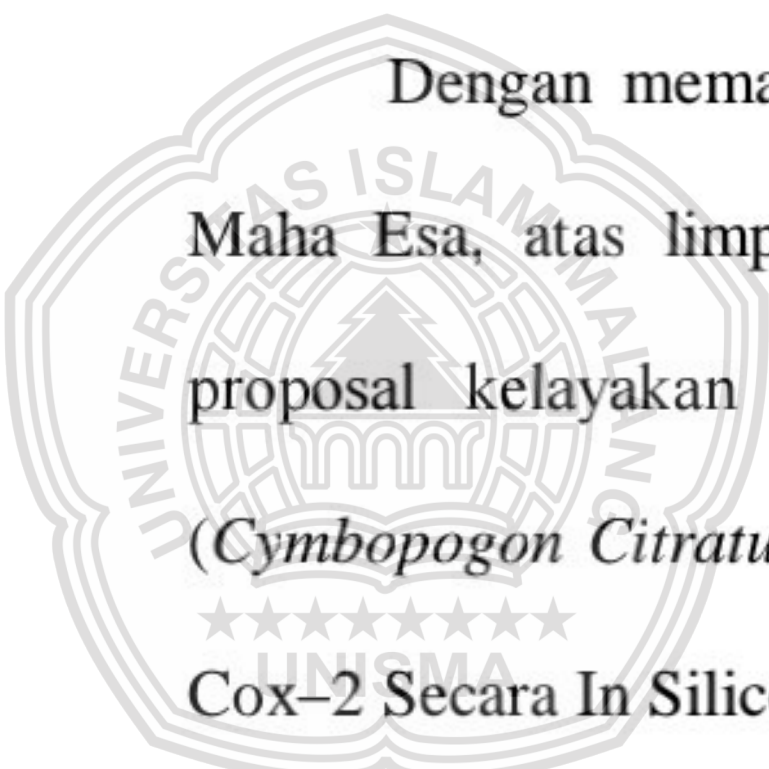
Method: This research is computationally study. The affinity of the lemon grass leaf active compounds for protein COX-1 and COX-2 was measured using a autodoc Vina 1.5.6 with parameters are free bond energy and amino acid residues, which were visualized using Biovia Studio. The second stage is pharmacokinetic testing using the pkcsm online tools website by looking at the ADMET value (absorption, distribution, metabolism, excretion, toxicity). The model for analysis is using analytical descriptive and validation of molecular anchoring is based on Root Mean Square Deviation.

Results: The active compounds have high affinity for COX-1 is geraniol (ΔG -3,6 kcal/mol) with the same amino acid residue 0%; terpinool acid (ΔG -3,9 kcal/mol) with the same amino acid residue 0%; trans-citral (ΔG -4,0 kcal/mol) with the same amino acid residue 0%. The active compounds have high affinity for COX-2 is Isoorientin (ΔG -11 kcal/mol) with the same amino acid residue 42%; Luteolin (ΔG -9,6 kcal/mol) with the same amino acid residue 72%; Quercetin (ΔG -9,5 kcal/mol) with the same amino acid residue 42%. Each active compound tested had the same amino acid residue as the control drug, and attached to the active site of the target protein. The results of pharmacokinetic properties showed that all active compounds had absorption values above 30%, could not penetrate the brain barrier, good VDss values except for caffeic acid, CYP inhibitors were not found, total clearance values were between 0.3 to 1,2 and not toxic.

Conclusion: The active compounds of lemon grass leaf has a potential to be an anti-inflammatory by activation COX-1 and inhibit COX-2 as evidenced by the similarity of amino acids to the control drug and the active site of the target protein. Pharmacokinetic test found that the active compound of lemon grass leaf is good for oral consumption and does not cause hepatotoxicity.

Keywords: *anti-inflammatory; Cymbopogon citratus; in silico.*

KATA PENGANTAR



Dengan memanjatkan puji syukur ke hadirat Allah SWT atau Tuhan Yang Maha Esa, atas limpahan rahmat dan hidayah-Nya penulis dapat menyelesaikan proposal kelayakan yang berjudul: “Uji Potensi Senyawa Aktif Daun Serai (*Cymbopogon Citratus*) Sebagai Antiinflamasi Dengan Aktivasi Cox-1 Dan Inhibisi Cox-2 Secara In Silico”.

Dengan selesainya proposal ini penulis menyampaikan ucapan terima kasih sebesar-besarnya kepada Dian Novita W S.Farm M.Imun, dr. Yeni Amalia Sp.A M.Kes dan segenap pihak yang telah banyak membantu yang tidak dapat penulis sebutkan satu persatu.

Sangat disadari repository.unisma.ac.id bagi penulis masih banyak kekurangan dalam penulisan ini, oleh karena itu penulis sangat mengharapkan saran dan masukan yang membangun guna untuk menyempurnakan dan agar tulisan ini bermanfaat bagi yang membutuhkan.

Malang, 18 januari 2023

Penulis.

DAFTAR ISI



RIWAYAT HIDUP..... iv

UCAPAN TERIMA KASIH v

RINGKASAN..... vii

SUMMARY viii

KATA PENGANTAR..... ix

DAFTAR ISI x

DAFTAR TABEL..... xiii

DAFTAR GAMBAR xiv

DAFTAR SINGKATAN..... 1

WHO *World Health Organization*..... 1

COX Siklooksigenase..... 1

BAB I..... 1

PENDAHULUAN 1

1.1 Latar Belakang repository.unisma.ac.id 1

1.2 Rumusan Masalah 3

1.3 Tujuan Penelitian..... 3

1.4 Manfaat Penelitian..... 3

1.4.1 Manfaat Ilmiah 3

1.4.2 Manfaat Praktis 4

BAB II..... 5

2.1 Tanaman Serai 5

2.1.1 Morfologi Tanaman Serai 5

2.1.2 Taksonomi Tanaman Serai..... 5

2.1.3 Senyawa Aktif Serai 6

2.2 Inflamasi 7

2.2.1 Definisi Inflamasi 7

2.2.2 Mekanisme Inflamasi..... 8

2.2.3 Struktur Molekular COX 9

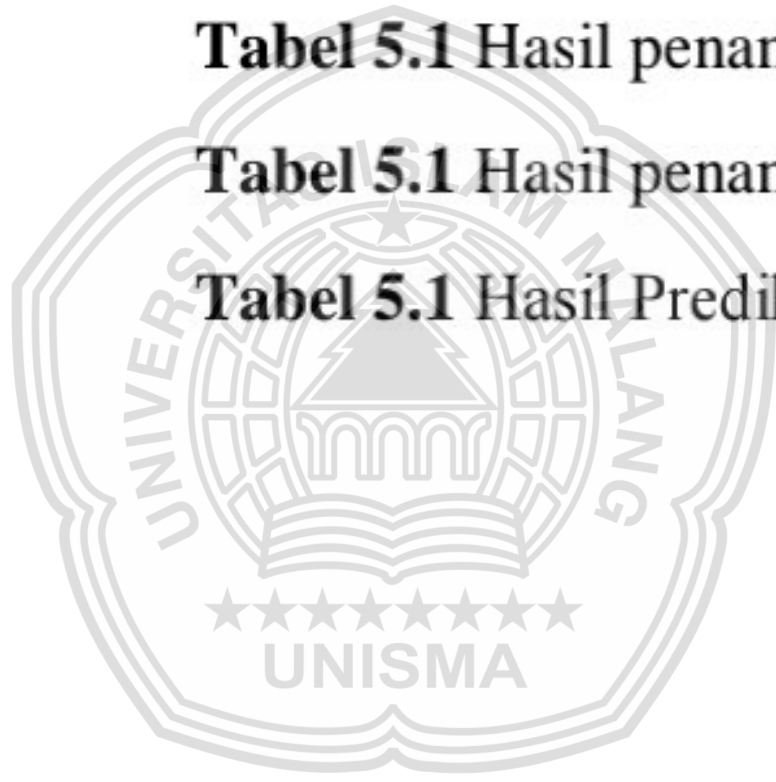
2.2.4 COX 1..... 11

2.2.5 COX 2.....	13
2.3 Penelitian <i>In Silico</i>	14
2.4 Penambatan Molekul.....	14
2.4.1 Validasi	15
2.4.2 Analisa Data.....	15
2.5 Uji Farmakokinetik.....	16
2.5.1 Analisa Data.....	16
2.6 Kerangka Teori	19
BAB III.....	20
KERANGKA KONSEP PENELITIAN.....	20
3.1 Kerangka Konsep	20
.....	20
3.2 Hipotesis	21
3.2.1 Hipotesis 1.....	21
3.2.2 Hipotesis 2.....	21
3.2.3 Hipotesis 3	21
3.3 Variabel Penelitian.....	22
3.3.1 Varibel Bebas	22
3.3.2 Variabel Terikat.....	22
3.4 Definisi Operasional	22
BAB IV	25
METODE PENELITIAN	25
4.1 Desain Penelitian.....	25
4.2 Tempat dan Waktu Penelitian	25
4.3 Bahan Penelitian.....	25
4.4 Alat Penelitian.....	25
4.5 Preparasi Ligan dan Protein	26
4.7 Penambatan Molekul	26
4.7.1 Validitas	27
4.7.2 Analisa Hasil	27
4.8 Uji Sifat Farmakokinetik	28
4.8.1 Analisa Data.....	28
BAB V.....	29

HASIL PENELITIAN.....	29
5.1 Uji Validasi	29
5.2 Hasil Penambatan senyawa aktif dengan protein Cox-1	29
5.3 Hasil Penambatan senyawa aktif dengan protein Cox-2	31
5.4 Hasil Uji Sifat Farmakokinetik dan Toksisitas Senyawa Aktif Daun Serai.....	32
BAB VI	33
PEMBAHASAN.....	33
6.1 Uji Validasi	33
6.2 Penambatan Molekul Senyawa Aktif Daun Serai terhadap COX-1	33
6.3 Penambatan Molekul Senyawa Aktif Daun Serai terhadap COX-2.....	35
6.4 Prediksi Sifat Farmakokinetik dan Toksisitas Senyawa Aktif Daun Serai	38
BAB VII	41
PENUTUP	41
7.1 Kesimpulan	41
7.2 SARAN.....	41
DAFTAR PUSTAKA	42

DAFTAR TABEL

Tabel 5.1 Hasil validasi.....	25
Tabel 5.1 Hasil penambatan senyawa dengan COX-1.....	25
Tabel 5.1 Hasil penambatan senyawa dengan COX-2	27
Tabel 5.1 Hasil Prediksi sifat farmakokinetik.....	28



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Tanaman Serai	5
Gambar 2.2 Struktur enzim COX	10
Gambar 2.3 Struktur 3D protein COX-1	12
Gambar 2.4 Struktur 3D protein COX-2... ..	13
Gambar 6.1 Prediksi senyawa aktif terhadap Cox-1	29
Gambar 6.2 Interaksi geraniol dengan COX-1.....	30
Gambar 6.3 Interaksi Terpinol dengan COX-1.....	30
Gambar 6.4 Interaksi Trans-sitral dengan COX-1.....	31
Gambar 6.5 Prediksi senyawa aktif terhadap Cox-2	29
Gambar 6.6 Interaksi Luteolin dengan COX-2.....	30
Gambar 6.7 Interaksi Isoorientin dengan COX-2.....	30
Gambar 6.8 Interaksi Quercetin dengan COX-2.....	31

DAFTAR SINGKATAN

WHO

World Health Organization

COX

Siklooksigenase

OAINS

antiinflamasi non-steroid

TXA

tromboksan A2

PGI

Prostasiklin

PGE

Prostagladin

Vdn

Van der Walls

repository.unisma.ac.id

BAB I PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Manusia dapat merasakan nyeri ketika mengalami inflamasi berupa luka, sakit kronis, infeksi, pembedahan maupun intervensi medis lainnya. Nyeri sendiri didefinisikan sebagai bentuk stimulus sensorik dan emosional yang tidak nyaman yang berhubungan adanya kerusakan jaringan yang mengganggu aktivitas. Hal ini dapat diatasi dengan dengan terapi non-farmakologi seperti fisioterapi atau pembedahan dan upaya farmakoterapi dengan pemberian obat analgesik atau obat antiinflamasi non-steroid (OAINS) (Sinardja 2016).

Pada dasarnya inflamasi disebabkan oleh adanya kerusakan pada membran fosfolipida, enzim fosfolipase A₂ akan merespon hal tersebut dengan menghasilkan asam arakhidonat. Enzim siklooksigenase mengubah asam arakhidonat menjadi prostaglandin, tromboksan dan prostasiklin, yang berfungsi sebagai mediator inflamasi seperti meningkatnya permeabilitas pembuluh darah, vasodilator, menghambat agregasi platelet (Meiriana 2018). Enzim siklooksigenase (COX) terbagi COX-1 dan COX-2, yang sama-sama memiliki gugus heme di sisi aktif peroksidase dan sisi aktif oksigenase untuk penempelan asam arakhidonat. Perbedaan dari COX-1 dan COX-2 adalah pada *splicing*, stabilitas dan efektifitas translasional mRNA, dimana COX-1 berfungsi sebagai respon inflamasi pada homeostatis tubuh, sedangkan COX-2 berfungsi sebagai respon inflamasi patologis (Puratchikody *et al.* 2016).

Tanaman serai (*Cymbopogon citratus*) adalah tumbuhan tergolong dalam famili Piperaceae yang secara empiris dimanfaatkan sebagai obat batuk, gangguan lambung (gastritis), bengkak-bengkak, menghilangkan bau badan, keputihan, hidung berdarah, mulut berbau. Penelitian sebelumnya kandungan senyawa aktif ekstrak daun serai diantaranya isoorientin, cafeic acid, quercetin, chlorogenic acid, terpenoid, tanin, alkaloid, glycoside, phenol terbukti menurunkan odem kaki pada mencit yang diinduksi karagenan 2% (Inayati *et al.* 2010). Penelitian lainnya infusa daun serai memiliki kemampuan menurunkan nyeri yang ditunjukkan oleh penurunan jumlah geliat pada mencit betina yang diberikan asam asetat secara intraperitoneal (Merangin *et al.* 2018). Dari penelitian tersebut menyebutkan bahwa daun serai memiliki potensi sebagai antiinflamasi, namun mekanismenya masih belum diketahui secara pasti.

Penelitian ini dilakukan berfokus pada penemuan calon obat herbal antiinflamasi daun serai (*Cymbopogon citratus*) dengan memprediksikan mekanismenya sebagai COX-1 inhibitor dan COX-2 inhibitor, oleh karena itu penelitian akan dilakukan secara *in silico* dikarenakan metode tersebut cukup akurat dan cepat dalam memprediksi mekanisme senyawa calon obat baru. Parameter yang digunakan adalah energi ikatan bebas dan persamaan residu asam amino. Parameter tersebut menginterpretasikan kekuatan ikatan dan keefektifitasan senyawa aktif daun serai terhadap protein target (Gabriella, 2018). Adapun obat kontrol yang digunakan yaitu ketoprofen sebagai kontrol obat COX-1 inhibitor dikarenakan mekanismenya selektif pada penghambatan aktivitas COX-1 dibandingkan obat yang lain. Sedangkan kontrol COX-2 adalah celecoxib dengan mekanisme yang sama yaitu selektif pada penghambatan aktifitas COX-2 (Sinardja 2016).

1.2 Rumusan Masalah

1. Bagaimanakah afinitas dari penambatan molekul antara senyawa aktif daun serai (*Cymbopogon citratus*) terhadap COX-1 yang dibandingkan dengan obat ketoprofen?
2. Bagaimanakah afinitas dari penambatan molekul antara senyawa aktif daun serai (*Cymbopogon citratus*) terhadap COX-2 yang dibandingkan dengan obat celecoxib?
3. Bagaimanakah prediksi sifat farmakokinetik senyawa aktif daun serai (*Cymbopogon citratus*)

1.3 Tujuan Penelitian

1. Untuk mengetahui afinitas ikatan penambatan molekul antara senyawa aktif daun serai (*Cymbopogon citratus*) terhadap COX-1 yang dibandingkan dengan obat ketoprofen.
2. Untuk mengetahui afinitas ikatan penambatan molekul antara senyawa aktif daun serai (*Cymbopogon citratus*) terhadap COX-2 yang dibandingkan dengan obat celecoxib.
3. Untuk mengetahui prediksi sifat farmakokinetik senyawa aktif daun serai (*Cymbopogon citratus*)

1.4 Manfaat Penelitian

1.4.1 Manfaat Ilmiah

Penelitian ini dapat dijadikan landasan teori mengenai potensi senyawa aktif daun serai (*Cymbopogon citratus*) sebagai Antiinflamasi berdasarkan afinitas ikatan senyawa aktif dengan enzim COX-1 dan COX-2.

1.4.2 Manfaat Praktis

Memperoleh senyawa aktif tunggal daun serai (*Cymbopogon citratus*) yang dapat dilanjutnya ke penelitian selanjutnya sebagai dasar penemuan calon obat herbal baru antiinflamasi.



BAB VII

PENUTUP

7.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil dan analisa data yang didapatkan dari penelitian ini dapat disimpulkan bahwa:

1. Senyawa aktif daun serai yaitu geraniol, terpinol, trans-citral mempunyai afinitas rendah terhadap COX-1. dengan energi ikatan bebas lebih positif dibandingkan kontrol obat dengan kesamaan residu asam amino 0%, yang berarti senyawa aktif tidak berpotensi menghambat COX-1.
2. Senyawa aktif daun serai yaitu Isoorientin, luteolin dan Quercetin mempunyai afinitas tinggi terhadap COX-2 dengan energi ikatan bebas lebih tinggi dibandingkan kontrol celecoxib. dan persamaan residu asam amino dibandingkan kontrol diatas 37%
3. Hasil sifat farmakokinetik didapatkan semua senyawa aktif memiliki nilai absorpsi diatas 30%, tidak dapat menembus sawar otak kecuali sitral dan geraniol, nilai VDss baik kecuali caffeic acid, CYP inhibitor tidak ditemukan, nilai total clearance antara 0,3 sampai 1,2 dan tidak bersifat hepatotoksik

7.2 SARAN

Perlu dilakukan penelitian lanjutan secara *in vivo* potensi senyawa aktif daun serai sebagai antiinflamasi dengan menginduksi pendarahan gastrointestinal mencit, kemudian diberikan formulasi pakan dengan kandungan ekstrak daun serai selama 1 minggu, dengan diharapkan penyembuhan hewan perlakuan lebih cepat dibandingkan kontrol.

DAFTAR PUSTAKA

- Adiguna, Prananda, And Oedijani Santoso. 2017. “Pengaruh Ekstrak Daun Serai (Cymbopogon Citratus) Pada Berbagai Konsentrasi Terhadap Viabilitas Bakteri Streptococcus Mutans.” *Diponegoro Medical Journal (Jurnal Kedokteran Diponegoro)* 6 (4): 1543–50.
- Alvareda, Elena, Pablo Miranda, Victoria Espinosa, Helena Pardo, Margot Paulino Zunini, Elena Alvareda, Pablo Miranda, Victoria Espinosa, And Helena Pardo. 2017. “196 Antiinflammatory Activity Of Phenolic Compounds Extracted From Uruguayan Propolis And Grape.” *Journal Of Biomolecular Structure And Dynamics* 1102. <https://doi.org/10.1080/07391102.2015.1032833>.
- Alzobaay, D Amer. 2019. “Phytochemical Screening , Chemical Composition And Antibacterial Activity Of Lemongrass (Cymbopogon Citratus) Leaves Extracts * Address For Correspondence Phytochemical Screening , Chemical Composition And Antibacterial Activity Of Lemongrass (Cymbopog,” No. October.
- Battistone MJ, Sawitzke AD. *Clinical Medicine Insights : Therapeutics Celecoxib in the Treatment of selective COX-2*. 2016;(March 2010).
- Daura, Ana, Travassos De Oliveira, Mirelly Dianne, Santos De Miranda, Íris Trindade, Tenório Jacob, César Augusto, Et Al. 2018. “Bioorganic & Medicinal Chemistry Molecular Docking Study Of Indole- N -Acyldiazone Derivatives.” *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, No. May: 1–9. <https://doi.org/10.1016/J.Bmc.2018.07.024>.
- Damayanti DS, Nurdiana, Chandra Kusuma HMS, Soeatmadji DW. The potency

of soursop leaf water extract on activating GLP-1R, inhibiting DPP4 and FOXO1 protein based on in silico analysis. *Int J Appl Pharm.* 2019;11(Special Issue 6):72–9.

Destyka, Fridiana. 2012. *No Uji Antiinflamasi Ekstrak Umbi Rumput Teki (Cyperus Rotundus L) Pada Kaki Tikus Wistar Jantan Yang Diinduksi Karagen. Materials Science And Engineering A.* Vol. 27.

Dinata, Deden I, Hardhi Suryatno, Ida Musfiroh, And Shelvy E Suherman. 2014. “Simulasi Docking Molekuler Senyawa Xanthorrhizol Sebagai Antiinflamasi Terhadap Enzim COX-1 Dan COX-2 Molecular Docking Simulation Of Xanthorrhizol Compounds Derived From Temulawak As Antiinflammatory On Enzymes COX-1 And COX-2.” *Ijgst* 1 (1): 7–13.

Ekowati J, Diyah NW, Nofianti KA, Hamid IS, Siswandono. Molecular docking of ferulic acid derivatives on P2Y12 receptor and their ADMET prediction. *J Math Fundam Sci.* 2018;50(2):203–19.

Fadhilatuz, Zuhroh. 2018. “Uji Efek Antiinflamasi Ekstrak Etanol Daun Serai (Piper Betle L.) Dan Pengaruhnya Terhadap Jumlah Leukosit Pada Tikus Jantan Yang Diinduksi Karagenan.” *Analisis Kesadahan Total Dan Alkalinitas Pada Air Bersih Sumur Bor Dengan Metode Titrimetri Di PT Sucofindo Daerah Provinsi Sumatera Utara*, No. Cmc: 44–48.

Febriantara, Syam, Ruslin, And Yamin. 2014. “Studi In Silico Senyawa 2-Amino-5-(3-(4-Hydroxy-3,5-Dimethoxy- Benzoyl)Guanidino)Pentanoic Acid Dan Turunannya Sebagai Inhibitor Phospodiesterase-5.” *Majalah Farmasi, Sains, Dan Kesehatan* 2 (1): 22–26.

- Febrina, Dina. 2019. "FORMULASI DAN EVALUASI SEDIAAN SIRUP DAUN SERAI (*Cymbopogon Citratus*).” *Viva Medika: Jurnal Kesehatan, Kebidanan Dan Keperawatan* 10 (2): 135–39. <https://doi.org/10.35960/Vm.V10i2.455>.
- Francisco, Vera, Artur Figueirinha, And Gustavo Costa. 2018. "Chemical Characterization And Anti- Inflammatory Activity Of Luteolin Glycosides Isolated From Lemongrass.” *Journal Of Functional Foods* 10: 436–43. <https://doi.org/10.1016/J.Jff.2014.07.003>.
- Gabriella. 2018. "Validasi Dan Optimasi Penambatan Senyawa Ko-Kristal Pada Matrix Metalloproteinase-9 (4h3x.Pdb) Menggunakan Software Autodock Vina” 9: 33.
- Ganesan, Kumar, And Baojun Xu. 2017. "Polyphenol-Rich Dry Common Beans (*Phaseolus Vulgaris* L.) And Their Health Benefits.” *International Journal Of Molecular Sciences* 18 (11). <https://doi.org/10.3390/Ijms18112331>.
- Hardjono, Suko. 2013. "Sintesis Dan Uji Aktivitas Antikanker Senyawa 1-(2-Klorobenzoiloksi)Urea Dan 1-(4-Klorobenzoiloksi)Urea.” *Berkala Ilmiah Kimia Farmasi* 2 (1): 16–21.
- Inayati, Alfi, Jurusan Farmasi, Fakultas Kedokteran, And Ilmu Kesehatan. 2010. *Uji Efek Analgetik Dan Antiinflamasi Ekstrak Etanol 70*.
- John L. Prostaglandins, NSAIDs, and Gastric Mucosal Protection. 2008
- Meiriana, Agnes. 2018. "Uji Efek Anti Inflamasi Ekstrak Etanol Akar Krokot Belanda (*Talinum Triangulare* (Jacq.)Willd) Pada Mencit Putih Betina.” *Skripsi*.

Meng, Xuan-Yu, Hong-Xing Zhang, Mihaly Mezei, And Meng Cui. N.D.
“Molecular Docking: A Powerful Approach For Structure-Based Drug
Discovery.”

Merangin, D I Disbudpar, Freddy Pattiselanno, George Mentansan, Vincent
Nijman, K. Anne Isola Nekarlis, A I Nuri Pratiwi, Program Studi, Et Al. 2018.
“Covariance Structure Analysis Of Health-Related Indicators In The Elderly
At Home With A Focus On Subjective Health ”
<https://doi.org/10.1016/j.gecco.2019.e00539>

Miciaccia, Morena, Benny Danilo Belviso, Mariaclara Iaselli, Gino Cingolani,
Savina Ferorelli, Marianna Cappellari, Paola Loguercio Polosa, And Maria
Grazia Perrone. 2021. “Three - Dimensional Structure Of Human
Cyclooxygenase (H COX)- 1.” *Scientific Reports*, 1–18.
<https://doi.org/10.1038/s41598-021-83438-z>.

Mubarika, Sita Az Zahra, Dini Sri Damayanti, And Ariani Ratri Dewi. 2020. “Studi
In Silico : Potensi Anthelmintik Senyawa Aktif Bawang Putih (Allium
Sativum L .) Dalam Menghambat Protein Target Acetylcholinesterase , Beta
Tubulin Dan Aktivasi Voltage Dependent L Type Calcium Channel In Silico
Study : Anthelmintic Potential Of,” 83–93.

Pradeep, Natarajan, Manne Munikumar, Sandeep Swargam, Kanipakam Hema,
Katari Sudheer Kumar, And Amineni Umamaheswari. 2015. “197
Combination Of E-Pharmacophore Modeling, Multiple Docking Strategies
And Molecular Dynamic Simulations To Discover Of Novel Antagonists Of
BACE1.” *Journal Of Biomolecular Structure And Dynamics* 1102.

<https://doi.org/10.1080/07391102.2015.1032834>.

Puratchikody, Ayarivan, Dharmaraj Sriram, Appavoo Umamaheswari, And Navabshan Irfan. 2016. "3 - D Structural Interactions And Quantitative Structural Toxicity Studies Of Tyrosine Derivatives Intended For Safe Potent Inflammation Treatment." *Chemistry Central Journal*, 1–19.

<https://doi.org/10.1186/S13065-016-0169-9>.

Pires DE V, Blundell TL, Ascher DB. pkCSM: predicting small-molecule pharmacokinetic properties using graph-based signatures (Theory- How to Enterpret pkCSM Result). pKCSM [Internet]. 2015;5. Available from: <http://biosig.unimelb.edu.au/pkcsm/theory>

Ramírez, David, And Julio Caballero. 2018. "Is It Reliable To Take The Molecular Docking Top Scoring Position As The Best Solution Without Considering Available Structural Data?" *Molecules* 23 (5): 1–17. <https://doi.org/10.3390/Molecules23051038>.

Sinardja, Cynthia. 2016. "Inhibitor COX."

Shella. Uji Efek Analgesik Infusa Daun Serai (*Cymbopogon Citratus*) Pada Mencit Betina Galur Swiss Terinduksi Asam Asetat. 2018;39.

Soleha, Maratu, Ani Isnawati, Nyoman Fitri, Rosa Adelina, Hamim Tsalis Soblia, And Winarsih Winarsih. 2018. "Profil Penggunaan Obat Antiinflamasi Nonstroid Di Indonesia." *Jurnal Kefarmasian Indonesia* 8 (2): 109–17. <https://doi.org/10.22435/Jki.V8i2.316>.

Sudewa, Ida Bagus Ari, And I Gede Budiarta. 2017. "Siklooksigenase, Jalur

Arakidonat, Dan Nonsteroidal Antiinflammatory Drugs.” *Anestesiologi Dan Reanimasi Fakultas Kedokteran Universitas Udayana*, 1–19.

Untung, Ismail. 2017. “Tinjauan Penggunaan Obat Anti Inflamasi Non Steroid (Oains) Pada Pasien Osteoarthritis.” *Fakultas Kedokteran Universitas Hasanuddin*, 1–52.

Wahyudi, Eko. 2015. “Studi Hubungan Kuantitatif Struktur Aktivitas Dari Amidasi Senyawa Etil-P- Metoksisinamat Sebagai Antiinflamasi Dengan Pendekatan Hansch Dan Komputasi.”

Yuliana, Fransiska Dita, And Ari Mu. 2019. “Pengaruh Pemberian Kombinasi Herba Cymbopogon Nardus L. Dan Daun Persea Americana M. Terhadap Kadar High Density Lipoprotein Pada Rattus Norveicus Hiperkolesterol.” *Journal Of Chemical Information And Modeling* 53 (9): 1689–99.

Yuliningtyas, Anti Wulan, Hari Santoso, And Ahmad Syauqi. 2019. “Uji Kandungan Senyawa Aktif Minuman Jahe Serai (Zingiber Officinale Dan Cymbopogon Citratus).” *Bioscience-Tropic* 4 (2): 1–6.