

**ANALISIS *MOLECULAR DOCKING* POTENSI  
SENYAWA TANAMAN PEGAGAN (*Centella asiatica*)  
SEBAGAI PENGOBATAN TBC PARU DENGAN  
MENGHAMBAT BAKTERI *Mycobacterium tuberculosis***

**SKRIPSI**

**Disusun Untuk Memenuhi Sebagian Persyaratan  
Mencapai Derajat Sarjana Farmasi**



**Diajukan Oleh :  
Hanif Adi Prayoga  
NIM : C12020019**

**PROGRAM STUDI FARMASI PROGRAM SARJANA  
FAKULTAS ILMU KESEHATAN  
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH GOMBONG**

**2024**

**ANALISIS *MOLECULAR DOCKING* POTENSI  
SENYAWA TANAMAN PEGAGAN (*Centella asiatica*)  
SEBAGAI PENGOBATAN TBC PARU DENGAN  
MENGHAMBAT BAKTERI *Mycobacterium tuberculosis***

**SKRIPSI**

**Disusun Untuk Memenuhi Sebagian Persyaratan  
Mencapai Derajat Sarjana Farmasi**



**Diajukan Oleh :  
Hanif Adi Prayoga  
NIM : C12020019**

**PROGRAM STUDI FARMASI PROGRAM SARJANA  
FAKULTAS ILMU KESEHATAN  
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH GOMBONG**

**2024**

## HALAMAN PERSETUJUAN

ANALISIS *MOLECULAR DOCKING* POTENSI SENYAWA PEGAGAN  
(*Centella asiatica*) SEBAGAI PENGOBATAN TBC PARU DENGAN  
MENGHAMBAT BAKTERI *Mycobacterium tuberculosis*

Telah disetujui dan dinyatakan telah memenuhi syarat untuk diujikan  
pada tanggal 16 Agustus 2024

Yang dipersiapkan dan disusun oleh :

Hanif Adi Prayoga

NIM : C12020019

Susunan Tim Pembimbing

1. Sugeng Supriyanto, M.S.Farm (Pembimbing 1) (.....)
2. Apt. Naelaz Zukhruf W.K, M. Pharm.Sci (Pembimbing 2) (.....)

Mengetahui,

Ketua Program Studi Farmasi Sarjana  
Fakultas Ilmu Kesehatan  
Universitas Muhammadiyah Gombong



(apt. Naelaz Zukhruf Wakhidatul Kiromah, M.Pharm.Sci)

NIDN. 0618109202

## HALAMAN PENGESAHAN

ANALISIS *MOLECULAR DOCKING* POTENSI SENYAWA PEGAGAN  
(*Centella asiatica*) SEBAGAI PENGOBATAN TBC PARU DENGAN  
MENGHAMBAT BAKTERI *Mycobacterium tuberculosis*


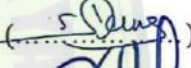
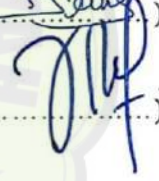
Yang dipersiapkan dan disusun oleh :

Hanif Adi Prayoga

NIM : C12020019

Yang dipertahankan di depan Tim Penguji  
pada tanggal 16 Agustus 2024

Susunan Tim Penguji

1. Apt. Drs. Muh Husnul Khuluq, M.Farm (..... )
2. Sugeng Supriyanto, M.S.Farm (..... )
3. Apt. Naelaz Zukhruf W.K, M.Pharm.Sci (..... )

Mengetahui,

Ketua Program Studi Farmasi Sarjana  
Fakultas Ilmu Kesehatan  
Universitas Muhammadiyah Gombong



(apt. Naelaz Zukhruf Wakhidatul Kiromah, M.Pharm.Sci)

NIDN. 0618109202

## HALAMAN PERNYATAAN KEASLIAN PENELITIAN

Saya yang bertanda tangan dibawah ini :

Nama : Hanif Adi Prayoga

NIM : C12020019

Program Studi : S1 Farmasi

Judul Penelitian : Analisis *Molecular Docking* Potensi Senyawa Pegagan (*Centella asiatica*) Sebagai Pengobatan TBC Paru dengan Menghambat Bakteri *Mycobacterium tuberculosis*

Menyatakan dengan yang sebenarnya bahwa penelitian ini adalah hasil karya sendiri. Sepanjang pengetahuan saya, skripsi ini tidak berisi materi yang pernah dipublikasikan atau ditulis orang lain digunakan untuk menyelesaikan studi di perguruan tinggi lain, kecuali pada bagian tertentu yang saya ambil sebagai bahan acuan dan ditulis dalam daftar pustaka.

Demikian surat pernyataan ini saya buat dengan sebenar-benarnya dan dapat digunakan sebagaimana mestinya

Gombong, 24 September 2024

Yang menyatakan



Hanif Adi Prayoga

## PERNYATAAN BEBAS PLAGIARISME

Saya yang bertanda tangan dibawah ini :

Nama : Hanif Adi Prayoga  
Tempat, tanggal lahir : Kebumen, 15 April 2021  
Alamat : Selokerto, Rt 04/02, Sempor, Kebumen  
Nomor telp/hp : 0895422865013  
Alamat email : [hanifprayoga17@gmail.com](mailto:hanifprayoga17@gmail.com)

Dengan ini menyatakan dengan sesungguhnya bahwa skripsi saya yang berjudul :

***Analisis Molecular Docking Potensi Senyawa Pegagan (*Centella asiatica*)  
Sebagai Pengobatan TBC Paru dengan Menghambat Bakteri *Mycobacterium tuberculosis****

Bebas dari plagiarism dan bukan hasil karya orang lain.

Apabila dikemudian hari ditemukan seluruh atau Sebagian dari skripsi tersebut terdapat indikasi plagiarism, saya bersedia menerima sanksi sesuai peraturan perundang-undangan yang berlaku.

Demikian surat surat pernyataan ini dibuat dalam keadaan sadar tanpa unsur paksaan dari siapapun.

Gombong, 24 September 2024

Yang menyatakan



Hanif Adi Prayoga

## HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI

Sebagai civitas akademis Universitas Muhammadiyah Gombong, saya yang bertanda tangan dibawah ini :

Nama : Hanif Adi Prayoga  
NIM : C12020019  
Program Studi : Farmasi Program Sarjana  
Jenis Karya : Skripsi

Demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Universitas Muhammadiyah Gombong. **Hak bebas Royalti Noneklusif (Non – exclusive Royalti – Free Right)** atas skripsi saya yang berjudul :

*Analisis Molecular Docking* Potensi Senyawa Pegagan (*Centella asiatica*) Sebagai Pengobatan TBC Paru dengan Menghambat Bakteri *Mycobacterium tuberculosis*

Beserta perangkat yang ada (jika diperlukan). Dengan Hak Bebas Royalti Noneklusif ini Universitas Muhammadiyah Gombong berhak menyimpan, mengalihmedia/formatkan, mengelola dalam bentuk pangkalan data, merawat, dan mempublikasikan tugas akhir saya selama telah mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan sebagai pemilik Hak Cipta. Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Gombong, 24 September 2024

Yang menyatakan



Hanif Adi Prayoga

## KATA PENGANTAR

Puji dan syukur penulis panjatkan atas kehadiran Allah SWT karena rahmat dan hidayah-Nya, sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “Analisis *Molecular Docking* Potensi Senyawa Pegagan (*Centella asiatica*) Sebagai Pengobatan TBC Paru dengan Menghambat Bakteri *Mycobacterium tuberculosis*”. Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu persyaratan meraih gelar Sarjana Farmasi di Universitas Muhammadiyah Gombong.

Sholawat serta salam semoga selalu tercurahkan kepada junjungan kita, Nabi Muhammad SAW yang kita nantikan safa'atnya dihari akhir nanti. Terbentuknya skripsi ini tidak lepas dari bimbingan serta bantuan yang sangat berarti dari berbagai pihak, baik secara moril ataupun materi sehingga pada kesempatan ini, penulis mengucapkan terima kasih kepada :

1. Allah SWT yang selalu memberikan ridho dan karunia-Nya sehingga diberikan kesehatan serta kelancaran pada setiap proses yang ada.
2. Dr Hj. Herniyatun, M.Kep., Sp.Mat selaku Rektor Universitas Muhammadiyah Gombong.
3. apt. Naelaz Zukhruf Wakhidatul Kiromah, M.Pharm.Sci selaku Ketua Program Studi Farmasi Program Sarjana Universitas Muhammadiyah Gombong serta selaku pembimbing kedua yang telah meluangkan waktu, pemikiran dan memberi arahan dalam proses penyusunan skripsi ini.
4. Sugeng Supriyanto, M.S.Farm selaku dosen pembimbing pertama yang telah meluangkan waktu, pemikiran dan memberi arahan dalam proses penyusunan skripsi ini.
5. apt. Drs. Muh Husnul Khuluq, M. Farm selaku dosen penguji telah meluangkan waktu, pemikiran dan memberi arahan dalam proses penyusunan skripsi ini.
6. Seluruh civitas akademika Universitas Muhammadiyah Gombong yang telah memberikan bantuannya selama penyusunan skripsi ini.

7. Kedua orang tua dan keluarga yang selalu memberikan dukungan baik moril maupun materil, doa, motivasi dan semangat sehingga penulis dapat mengerjakan skripsi dengan lancar.
8. Seluruh teman-teman saya maupun semua pihak yang telah memberikan semangat, dukungan dan membantu dalam menyelesaikan skripsi ini.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih jauh dari kesempurnaan, sehingga penulis sangat mengharapkan kritik dan saran dari berbagai pihak demi terwujudnya karya yang lebih baik di masa mendatang. Sebagai ucapan terima kasih, penulis hanya mampu mendoakan semoga semua yang memberi bantuan mendapatkan balasan yang terbaik dari Allah SWT.

Gombong, 8 Agustus 2024



Hanif Adi Prayoga

NIM. C12020019

## HALAMAN PERSEMBAHAN

Skripsi ini saya persembahkan untuk :

1. Kedua orang tua saya beliau Bapak Tarno dan Ibu Sri Budihartati terima kasih atas segala pengorbanan selama ini dan terima kasih telah menjadi orang tua yang terbaik dan sangat luar biasa untuk anak anaknya.
2. Hanif Adi Prayoga selaku diri saya sendiri yang hebat sudah ada dalam proses ini.
3. Kakak saya, Aziz Nur Halim dan adik saya, Rizal Makarim yang saya sayangi.
4. Seluruh keluarga saya yang telah memberikan dukungan dan semangatnya untuk menyelesaikan ini.
5. Seluruh dosen Program Studi Farmasi Program Sarjana yang telah membimbing dan mengajarkan dengan ikhlas dan penuh kesabaran.
6. Teman-teman Program Studi Farmasi Program Sarjana.
7. Serta seluruh pihak yang terlibat dan tidak bisa disebutkan satu persatu dalam pelaksanaan dan penyusunan skripsi.

**PROGRAM STUDI FARMASI PROGRAM SARJANA  
FAKULTAS ILMU KESEHATAN  
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH GOMBONG**

**Skripsi, Agustus 2024**

**Hanif Adi Prayoga<sup>(1)</sup>, Sugeng Supriyanto<sup>(2)</sup>, Naelaz Zukhruf Wakhidatul Kiromah<sup>(3)</sup>**

**ABSTRAK**

**ANALISIS MOLECULAR DOCKING POTENSI SENYAWA PEGAGAN  
(*Centella asiatica*) SEBAGAI PENGobatan TBC PARU DENGAN  
MENGHAMBAT BAKTERI *Mycobacterium tuberculosis***

**Latar Belakang:** Tuberkulosis paru (TBC) menjadi masalah kesehatan global. Penyakit ini disebabkan oleh bakteri *M. tuberculosis* dan bersifat menular. *Global TB Report 2023* melaporkan bahwa Indonesia menempati posisi kedua dengan beban kasus TBC terbanyak di dunia. Isoniazid, salah satu obat lini pertama untuk TBC, sering mengalami resistensi. Tanaman pegagan memiliki potensi untuk dikembangkan sebagai alternatif anti-TBC.

**Tujuan penelitian:** Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi senyawa aktif dari tanaman pegagan sebagai anti-TBC dengan aktivasi protein *polyketide synthase 13* (Pks13) dan *Dihydrofolate reductase* (DHFR).

**Metode penelitian:** Penelitian ini dilakukan secara *in silico* menggunakan metode *molecular docking* antara protein Pks 13 dan DHFR dengan senyawa uji dan perbandingan menggunakan bantuan perangkat lunak Autodock. Senyawa uji yang digunakan adalah senyawa yang telah memenuhi persyaratan secara *druglikeness*, farmakokinetika, dan toksisitas. Perbandingan yang digunakan adalah isoniazid. Kemudian, dilakukan analisis secara *ANOVA*.

**Hasil Penelitian:** Hasil skrining senyawa tanaman pegagan didapatkan tiga senyawa yang memenuhi persyaratan yaitu *asiaticin*, *beta-Caryophyllene*, dan *centellin*. Hasil *docking* didapatkan senyawa yang terikat pada protein 4KM2 yaitu *asiaticin* -6.99 kkal/mol, *beta-Caryophyllene* -6.47 kkal/mol, dan *centellin* -6.73 kkal/mol. Sedangkan senyawa yang terikat pada protein 5V3Y yaitu *asiaticin* -3.89 kkal/mol, *beta-Caryophyllene* 6.38 kkal/mol, dan *centellin* -5.66 kkal/mol.

**Kesimpulan:** Berdasarkan hasil, senyawa metabolit sekunder tanaman pegagan yang memiliki potensi paling baik sebagai anti-TBC yaitu *asiaticin* dengan interaksi terkuat yang terjadi membentuk ikatan hidrogen.

**Saran:** perlu dilakukan perbandingan hasil *docking* dengan menggunakan perangkat lunak lain serta pengujian secara *in vitro* dan *in vivo*.

**Kata kunci :** *anti-TBC, in silico, molecular docking, tanaman pegagan*

---

<sup>1</sup>Mahasiswa Universitas Muhammadiyah Gombong

<sup>2</sup>Dosen Universitas Muhammadiyah Gombong

<sup>3</sup>Dosen Universitas Muhammadiyah Gombong

BACHELOR PHARMACY STUDY PROGRAM  
FACULTY OF HEALTH SCIENCE  
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH GOMBONG

Thesis , August 2024

Hanif Adi Prayoga<sup>(1)</sup>, Sugeng Supriyanto<sup>(2)</sup>, Naelaz Zukhruf Wakhidatul Kiromah<sup>(3)</sup>

## ABSTRACT

### MOLECULAR DOCKING ANALYSIS OF THE POTENTIAL OF PEGAGAN COMPOUNDS (*Centella asiatica*) AS A TREATMENT FOR PULMONARY TB BY INHIBITING *Mycobacterium tuberculosis* BACTERIA

**Background:** Pulmonary tuberculosis (TB) is a global health problem. This disease is caused by the bacterium *M. tuberculosis* and is transmissible. The Global TB Report 2023 indicates that Indonesia ranks second in the world for the highest burden of TB cases. Isoniazid, one of the first-line drugs for TB, often faces resistance. The *pegagan* plant has potential for development as an alternative anti-TB treatment.

**Purpose:** This study aims to determine the potential of active compounds from the *Centella asiatica* plant as anti-TB agents by targeting *polyketide synthase 13* (Pks13) and *Dihydrofolate reductase* (DHFR).

**Method:** This study was conducted *in silico* using molecular docking methods to evaluate interactions between the proteins Pks13 and DHFR and test compounds, with the aid of Auto dock software. The test compounds used meet the criteria for drug-likeness, pharmacokinetics, and toxicity. Isoniazid was used as a comparator. Subsequent analysis was performed using ANOVA.

**Results:** The screening results of compounds from the *pegagan* plant identified three compounds meeting the criteria: *asiaticin*, beta-Caryophyllene, and *centellin*. The *docking* results showed binding energies for the compounds with protein 4KM2 as follows: *asiaticin* -6.99 kcal/mol, beta-Caryophyllene -6.47 kcal/mol, and *centellin* -6.73 kcal/mol. For protein 5V3Y, the binding energies were: *asiaticin* -3.89 kcal/mol, beta-Caryophyllene -6.38 kcal/mol, and *centellin* -5.66 kcal/mol.

**Conclusion:** Based on the results, the secondary metabolite from the *pegagan* plant with the best potential as an anti-TB agent is *asiaticin*, which demonstrates the strongest interaction by forming hydrogen bonds.

**Recommendation:** It is recommended to compare docking results using other software and conduct *in vitro* and *in vivo* testing.

**Keywords:** *anti-TB, Centella asiatica, in silico, molecular docking*

---

<sup>1</sup>Student of Muhammadiyah Gombong University

<sup>2</sup>Lecturer of Muhammadiyah Gombong University

<sup>3</sup>Lecturer of Muhammadiyah Gombong University

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL .....	i
HALAMAN PERSETUJUAN.....	ii
HALAMAN PENGESAHAN .....	iii
HALAMAN PERNYATAAN KEASLIAN PENELITIAN.....	iv
PERNYATAAN BEBAS PLAGIARISME.....	v
HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI.....	vi
KATA PENGANTAR .....	vii
HALAMAN PERSEMBAHAN .....	ix
ABSTRAK.....	x
ABSTRACT.....	xi
DAFTAR ISI.....	xii
DAFTAR TABEL.....	xiv
DAFTAR GAMBAR.....	xv
DAFTAR LAMPIRAN .....	xvi
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	6
1.3 Tujuan.....	7
1.4 Manfaat.....	7
1.5 Keaslian Penelitian .....	8
BAB II TINJAUAN PUSTAKA .....	11
2.1 Tinjauan Teori .....	11
2.1.1 <i>Tuberculosis</i> (TBC).....	11
2.1.2 Protein.....	13
2.1.3 Tinjauan Umum tentang Pegagan ( <i>Centella asiatica</i> ).....	15
2.1.4 Tinjauan Senyawa Aktif Tanaman Pegagan.....	16
2.1.5 Studi <i>In silico</i> ( <i>Docking molecular</i> ) .....	19
2.1.6 Ikatan Kimia .....	20
2.1.7 Sumber Informasi .....	22
2.1.8 Perangkat lunak .....	27
2.2 Kerangka Teori.....	28
2.3 Kerangka Konsep .....	29

2.4 Hipotesis .....	29
<b>BAB III METODOLOGI PENELITIAN .....</b>	<b>30</b>
3.1 Desain atau rancangan penelitian .....	30
3.2 Tempat dan waktu penelitian.....	30
3.3 Variabel penelitian.....	30
3.4 Definisi operational .....	31
3.5 Instrumen penelitian .....	31
3.6 Teknik Pengumpulan Data .....	32
3.7 Teknik Analisis Data .....	34
<b>BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN .....</b>	<b>36</b>
4.1 Hasil Penelitian.....	36
4.2 Pembahasan Penelitian .....	56
4.3 Keterbatasan Penelitian .....	66
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN .....</b>	<b>67</b>
5.1 Kesimpulan.....	67
5.2 Saran .....	67
<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>	<b>68</b>
<b>LAMPIRAN.....</b>	<b>76</b>

## DAFTAR TABEL

Tabel 1.1 Keaslian Penelitian .....	8
Tabel 2.1 Senyawa Metabolit Sekunder Tanaman Pegagan ( <i>Centella asiatica</i> ) ...	18
Tabel 2.2 Parameter Farmakokinetik (ADMET) .....	24
Tabel 2.3 Klasifikasi LD <sub>50</sub> (BPOM, 2014) .....	25
Tabel 3.1 Definisi Operasional .....	31
Tabel 4.1 Senyawa Aktif Tanaman Pegagan .....	36
Tabel 4.2 Hasil Skrinning Lipinski .....	37
Tabel 4.3 Hasil Skrinning ADMET .....	40
Tabel 4.4 Senyawa Uji Terpilih .....	41
Tabel 4.5 Protokol dan Hasil Validasi <i>Docking</i> 5V3Y .....	45
Tabel 4.6 Protokol dan Hasil Validasi <i>Docking</i> 4KM2 .....	45
Tabel 4.7 Protokol dan Hasil Validasi <i>Docking</i> 4KL9 .....	46
Tabel 4.8 Tabel Nilai RMSD .....	46
Tabel 4.9 Analisis Hasil <i>Docking</i> .....	50
Tabel 4.10 Hasil Uji Normalitas .....	55
Tabel 4.11 Hasil Uji Homogenitas .....	55
Tabel 4.12 Hasil Uji <i>One Way Anova</i> Pada Kode Protein 5V3Y .....	56
Tabel 4.14 Hasil Uji <i>Post Hoc LSD</i> Pada Kode Protein 5V3Y .....	56

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Tanaman Pegagan (Ramandey & Pelipus, 2020).....	16
Gambar 2.2 Alur Kerja pkCSM (Pires <i>et al.</i> , 2015). .....	25
Gambar 2.3 Diagram Kerangka Teori .....	28
Gambar 2.4 Diagram Kerangka Konsep .....	29
Gambar 4.1 Preparasi Protein dan Ligan 5V3Y .....	41
Gambar 4.2 Preparasi Protein dan Ligan 4KM2.....	41
Gambar 4.3 Preparasi Protein dan Ligan 4KL9.....	42
Gambar 4.4 Hasil Validasi 5V3Y .....	42
Gambar 4.5 Hasil Validasi 4KM2 .....	43
Gambar 4.6 Hasil Validasi 4KL9.....	43
Gambar 4.7 Interaksi Protein dan Ligan Alami 5V3Y .....	44
Gambar 4.8 Interaksi Protein dan Ligan Alami 4KM2.....	44
Gambar 4.9 Interaksi Protein dan Ligan Alami 4KL9.....	45
Gambar 4.10 Senyawa Kandidat Obat yang telah dioptimasi .....	47
Gambar 4.11 Ligan Pembanding yang telah dioptimas.....	47
Gambar 4.12 Hasil <i>Docking</i> 5V3Y dengan Senyawa Kandidat Obat .....	48
Gambar 4.13 Hasil <i>Docking</i> 4KM2 dengan Senyawa Kandidat Obat.....	49
Gambar 4.14 Hasil <i>Docking</i> 4KM2 dengan Ligan Pembanding (Isoniazid) .....	49
Gambar 4.15 Hasil <i>Docking</i> 5V3Y dengan Ligan Pembanding (Isoniazid).....	50

## DAFAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Surat Pernyataaan Tidak Menggunakan Etik Penelitian .....	77
Lampiran 2. Lembar Bimbingan.....	78
Lampiran 3. Surat Pernyataan Cek Similarity/Plagiasi.....	80
Lampiran 4. Hasil Perhitungan Kesamaan Residu Asam Amino .....	81
Lampiran 5. Hasil <i>Binding affinity</i> Analisis <i>Docking</i> .....	82
Lampiran 6. Hasil Uji Statistik Normalitas.....	102
Lampiran 7. Hasil Uji Statistik Homogenitas.....	102
Lampiran 8. Hasil Uji Statistik ANOVA Pada Kode Protein 5V3Y .....	103
Lampiran 9. Hasil Uji <i>Post Hoc</i> Pada Kode Protein 5V3Y.....	103



# BAB I

## PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Infeksi bakteri tuberkulosis dapat menyebabkan penyakit menular pada paru-paru yang dikenal sebagai Tuberkulosis paru atau TBC paru. Penyebaran Tuberkulosis (TBC) antar manusia umumnya terjadi melalui udara (Vidyastari *et al.*, 2019). Percikan atau *droplet nucleus* berukuran kurang dari 5 mikron yang dikeluarkan saat batuk, bersin, atau berbicara oleh penderita TB paru atau TB laring dapat menjadi media penularan penyakit ini (Kemenkes RI, 2020).

Tuberkulosis paru terus menjadi masalah kesehatan global (Guno *et al.*, 2017). WHO menyatakan bahwa tahun 2030 akan mengakhiri epidemi tuberkulosis dan masuk dalam target SDGs bidang kehidupan sehat dan sejahtera (PPN, 2021). Pada tahun 2022, TBC menjadi penyebab kematian tertinggi kedua di dunia setelah COVID-19. Setiap tahun, lebih dari 10 juta orang terinfeksi TBC. Tanpa pengobatan, tingkat kematian akibat TBC bisa mencapai sekitar 50%. Secara global, TBC menyebabkan sekitar 1,3 juta kematian pada tahun 2022. Namun, dengan pengobatan yang direkomendasikan oleh WHO, 85% kasus TBC dapat disembuhkan.

Pada tahun 2022, terdapat 7,5 juta kasus TBC baru secara global. Tiga puluh negara dengan beban TBC tinggi menyumbang 87% dari total kasus TBC dunia pada tahun tersebut, dengan dua pertiga dari kasus global terjadi di delapan negara: India 27%, Indonesia 10%, Cina 7,1%, Filipina 7,0%, Pakistan 5,7%, Nigeria 4,5%, Bangladesh 3,6%, dan Republik Demokratik Kongo 3,0%. Indonesia menempati urutan kedua dengan jumlah kasus TBC terbanyak di dunia setelah India, diikuti oleh Cina. Di Indonesia, diperkirakan terdapat sekitar 1.060.000 kasus TBC dan 134.000 kematian akibat TBC setiap tahun, atau sekitar 17 kematian per jam (Kemenkes RI, 2024). Peta prevalensi TBC paru di Indonesia menunjukkan bahwa Indonesia bagian timur memiliki tingkat kasus tertinggi (44 %),

diikuti Sumatera (33%), Jawa dan Bali masing-masing 23% (Sugiarti *et al.*, 2018).

Obat kombinasi dosis tetap (KDT) digunakan pada pengobatan tuberkulosis paruyang terbukti efektif dalam menurunkan risiko resistensi obat yang biasa terjadi pada monoterapi. Obat antituberkulosis (OAT) utama untuk dewasa yaitu isoniazid, rifampisin, pirazinamid, etambutol, dan streptomisin. Standar pengobatan TB untuk kasus baru adalah regimen 2RHZE/4RH. Obat yang biasa digunakan untuk pasien OAT sebelumnya adalah (2RHZES/1RHZE/5RHE) (Kemenkes RI, 2020).

Masalah yang sering terjadi pada pengobatan TB adalah resistensi. Diperkirakan terdapat 1,3 juta kasus insiden TB yang resistan terhadap isoniazid pada tahun 2022 (WHO, 2023). Resistensi terhadap obat anti tuberkulosis (OAT) terutama terjadi karena mutasi pada gen *Mycobacterium tuberculosis*. Mutasi dapat diinduksi oleh inadekuatnya kadar terapeutik obat, terutama akibat ketidakpatuhan selama mengkonsumsi obat. Penggunaan OAT yang tidak tepat dan teratur dapat menimbulkan mutasi pada gen yang mengkode target OAT (Imam & Siregar, 2015).

Bakteri *Mycobacterium tuberculosis* penyebab *tuberculosis* memiliki target protein yang dapat digunakan dalam riset penemuan obat baru sehingga dapat mengurangi resistensi obat. Protein yang dapat digunakan sebagai target terapi penyakit TBC sehingga menghambat pertumbuhan bakteri *Mycobacterium tuberculosis* adalah *polyketide synthase 13* (Pks13) dan *Dihydrofolate reductase* (DHFR).

Enzim *polyketide synthase 13* (Pks13) merupakan protein pada bakteri *Mycobacterium tuberculosis* dengan kode protein 5V3Y (ligan asli 5V8). *Polyketide synthase 13* (Pks 13) adalah target obat tuberkulosis, karena Pks13 adalah enzim yang memainkan peran penting dalam proses biosintesis asam mikolat bakteri *M. tuberculosis* (Yu *et al.*, 2018). Obat antituberkulosis yang mempunyai mekanisme kerja menghambat biosintesis asam mikolat salah satunya adalah isoniazid. Mekanisme kerja

isoniazid dengan cara menghambat atau menghambat senyawa asam mikolat yang berperan dalam sintesis dinding sel *Mycobacterium tuberculosis* (Mtb). Kematian Mtb dapat terjadi apabila sintesis asam mikolat diganggu (Unissa *et al.*, 2016).

Isoniazid (INH) merupakan pro-drug yang diaktivasi oleh enzim katalase-peroksi-dase (KatG) untuk menghasilkan radikal yang menyerang nikotin-amida adenin dinukleotida (NAD) sehingga membentuk hasil tambahan kovalen. Hasil tambahan ini menghambat *reduktase enoyl-ACP*, InhA yang merupakan enzim yang diperlukan untuk sintesis asam lemak rantai sangat panjang yang digunakan untuk membentuk asam mikolat. Karena INH diaktivasi oleh KatG non-esensial, resistensi terhadap INH sering muncul melalui hilangnya fungsi mutasi pada gen katG (Aggarwal *et al.*, 2017). Memang benar, penyebab paling umum dari resistensi INH adalah hilangnya fungsi mutasi KatG-S315T, yang telah ditemukan pada 94% pasien Mtb yang resisten terhadap INH dan hingga 82% pada pasien Mtb yang resisten terhadap banyak obat (MDR) (Torres *et al.*, 2015). Selain itu, mutasi pada gen inhA dan wilayah promotornya, yaitu perubahan basa c-15t, semakin mempersulit pengobatan TB yang resisten terhadap obat, sehingga menyebabkan resistensi tidak hanya terhadap INH tetapi juga terhadap obat TB lini kedua, ethionamide (ETH) (Aggarwal *et al.*, 2017).

Enzim selanjutnya yang digunakan sebagai target adalah *Dihydrofolate reductase* dengan kode protein M. *tuberculosis* 4KM2, yang merupakan ligan asli ATR, dan 4KL9, yang merupakan ligan asli P33. Enzim dihidrofolate reduktase memainkan peran penting dalam metabolisme sel mikroba dan eukariota. Enzim ini mengkatalisis reduksi dihidrofolat menjadi tetrahidrofolat, yang merupakan senyawa penting dalam sintesis DNA dan asam amino (Wróbel *et al.*, 2020). Enzim *Dihydrofolate reductase* merupakan target obat antibakteri, hal ini dikarenakan enzim *Dihydrofolate reductase* adalah salah satu biosintesis nukleotida yang penting pada bakteri *Mycobacterium tuberculosis* (Zhang *et al.*, 2021). Jalur folat memainkan peran penting dalam kelangsungan

hidup sel dengan menghasilkan 5,10-metilen tetrahidrofolat sebagai donor satu karbon untuk sintesis *deoxythymidine monophosphate* (dTMP), purin, metionin dan histidin. Gangguan pada jalur ini menyebabkan kekurangan molekul-molekul tersebut, sehingga menyebabkan gangguan replikasi DNA dan akhirnya mengakibatkan kematian sel (Kumar *et al.*, 2015). Enzim *Dihydrofolate reductase* (DHFR) merupakan target yang potensial untuk pengembangan obat anti *tuberculosis* baru.

Kriteria penting lainnya dalam pemilihan suatu kode protein yaitu dengan menentukan beberapa nilai yaitu nilai resolusi, *R Value Free*, *R Value Work*, dan *R Value Observed* yang dapat dilihat pada *website Protein Data Bank*. Kriteria nilai resolusi yang baik apabila nilainya semakin kecil maka semakin baik untuk diamati (RCSB PDB, 2015). Selain itu, struktur protein dengan resolusi tinggi (kurang dari 2 Å) menunjukkan pengaturan yang teratur dari elektron, memungkinkan setiap atom terlihat dengan jelas dalam peta kerapatan elektron. Hal ini membuat analisis struktur protein lebih stabil dan akurat karena pergerakan atom-atom dalam protein relatif kecil (Artinda, 2016). *R-Value Free*, juga disebut *R Free*, adalah ukuran kesalahan antara intensitas difraksi yang diprediksi dari model struktur protein dan intensitas difraksi yang diamati secara eksperimental, tetapi tidak digunakan dalam proses penambahan model. Parameter ini digunakan untuk menghindari bias yang mungkin timbul selama proses penambahan model. *R-Value Work*, juga disebut *R Work*, adalah ukuran kesalahan antara intensitas difraksi yang diamati secara eksperimental dan intensitas difraksi yang diprediksi dari model struktur protein. Parameter ini digunakan untuk menilai sejauh mana model struktur protein dapat memprediksi data difraksi sinar-X secara akurat. Sedangkan *R Value Observed* merupakan parameter yang digunakan sebagai referensi untuk membandingkan dengan nilai yang diprediksi dari model struktur protein. Nilai *R Observed* tidak memiliki kriteria spesifik karena berbeda-beda tergantung pada kondisi eksperimen. Namun, nilai yang lebih rendah menunjukkan bahwa data difraksi sinar-X lebih akurat (RCSB PDB, 2015).

Keanekaragaman hayati di Indonesia menempati peringkat kedua terbesar di dunia (Ika, 2020). Indonesia memiliki hutan tropis dengan luas mencapai 143 juta hektar yang menjadikannya sebagai rumah bagi 80% tanaman obat di dunia. Kekayaan alam ini membuka peluang besar dalam pengembangan obat-obatan baru. Diperkirakan terdapat 25.000-30.000 tanaman yang berpotensi diolah menjadi obat. Sebuah penelitian terbaru dari pakar IPB University menemukan 1.845 spesies tanaman herbal yang memiliki potensi untuk menyembuhkan berbagai penyakit (FMIPA, 2020). Pemanfaatan tanaman obat sebagai bahan untuk pengobatan tradisional telah banyak dilakukan oleh masyarakat Indonesia (Adawiyah *et al.*, 2019).

Tanaman kaki kuda atau pegagan (*Centella asiatica*) adalah salah satu tanaman yang telah lama digunakan sebagai obat. Tanaman liar ini banyak dijumpai di daerah yang beriklim tropis seperti kawasan Asia Tenggara salah satunya Indonesia. Daun tanaman kaki kuda dipercayai memiliki khasiat sebagai antibakteri, anti inflamasi, hipotensi, insektisida, membersihkan darah, melancarkan peredaran darah, diuretika, antipiretika, meningkatkan saraf memori, dan menghambat jaringan bekas luka yang berlebihan (Rimporok A *et al.*, 2020). Senyawa kimia utama tanaman pegagan adalah flavonoid, triterpenoid, dan minyak atsiri. Kandungan triterpenoid pegagan terdiri dari *Madecassoside*, *Asiatic acid*, dan *Asiaticoside* (Jasmansyah *et al.*, 2020).

Tanaman pegagan mengandung senyawa yang diharapkan dapat menjadi salah satu alternatif pengobatan sebagai solusi senyawa alami anti tuberkulosis. *Molecular docking* atau *In silico* adalah simulasi komputasi yang digunakan untuk memperkirakan ikatan antara obat/ligan dengan reseptor/protein dengan cara menempelkan molekul kecil (ligan) pada sisi aktif reseptor, yang saat ini banyak digunakan dalam proses pengembangan dan penemuan obat baru dengan aktivitas yang lebih baik, sehingga dilakukan penelitian komputasi atau *docking* molekular (Pratama *et al.*, 2017). Penelitian pendahuluan menggunakan komputasi dilakukan untuk menentukan apakah senyawa tersebut memiliki potensi untuk mencegah

tuberkulosis dengan menargetkan protein dalam *M. tuberculosis*. Kesamaan residual antara ligan asli dan senyawa alami, serta skor *docking*, adalah kriteria yang diperlukan untuk mengevaluasi hasil prediksi. Nilai atau skor *docking* terbaik menunjukkan berapa banyak energi yang dibutuhkan ligan untuk terlibat dengan protein target; Semakin rendah (negatif) angkanya, semakin kuat kontakannya (semakin baik), dan kesamaan residu menunjukkan apakah senyawa alami memiliki potensi sebagai obat atau tidak (Endriyatno & Santoso, 2018).

Berdasarkan penjelasan diatas dapat diketahui bahwa senyawa tanaman pegagan (*Centella asiatica*) mempunyai potensi untuk menghambat pertumbuhan bakteri *Mycobacterium tuberculosis*, sehingga menjadi salah satu alternatif terapi bagi penderita *tuberculosis*. Penelitian mengenai potensi senyawa pegagan (*Centella asiatica*) sebagai pengobatan *tuberculosis* menggunakan metode *docking molecular* belum ditemukan, oleh sebab itu penelitian ini penting dilakukan guna mengeksplorasi potensi senyawa tanaman pegagan berdasarkan kimia komputasi.

## 1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang masalah yang telah uraikan maka rumusan masalah pada penelitian ini adalah:

- 1.2.1 Bagaimana potensi senyawa tanaman pegagan (*Centella asiatica*) sebagai *antituberculosis* secara *in silico* menggunakan metode *molecular docking*?
- 1.2.2 Bagaimana interaksi penambatan senyawa metabolit sekunder pada pegagan (*Centella asiatica*) terhadap protein *Polyketide synthase 13* dan *Dihydrofolate reductase* secara *in silico* menggunakan metode *molecular docking*?

### 1.3 Tujuan

#### 1.3.1 Tujuan umum

Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi dari senyawa pegagan (*Centella asiatica*) dalam menghambat protein *Polyketide synthase 13* dan *Dihydrofolate reductase* untuk pengobatan *tuberculosis* (TBC) secara *in silico* menggunakan metode *molecular docking*.

#### 1.3.2 Tujuan khusus

1.3.2.1 Mengidentifikasi senyawa tanaman pegagan (*Centella asiatica*) yang memiliki potensi sebagai penghambat bakteri *Mycobacterium tuberculosis* secara *in silico* menggunakan metode *molecular docking*.

1.3.2.2 Mengetahui interaksi penambatan senyawa metabolit sekunder pada pegagan (*Centella asiatica*) terhadap protein *Polyketide synthase 13* dan *Dihydrofolate reductase* secara *in silico* menggunakan metode *molecular docking*.

### 1.4 Manfaat

#### 1.4.1 Manfaat bagi pengembangan ilmu (bidang kefarmasian)

Penelitian ini dapat menjadi dasar untuk pengembangan obat baru yang lebih efektif dan aman untuk pengobatan *tuberculosis* serta dapat membuka peluang untuk penelitian lebih lanjut tentang senyawa tanaman pegagan (*Centella asiatica*) sebagai pengobatan *tuberculosis*.

#### 1.4.2 Manfaat bagi praktisi (tempat penelitian)

Penelitian ini dapat meningkatkan reputasi dan kualitas tempat penelitian di tingkat nasional maupun internasional. Hal ini karena penelitian ini merupakan penelitian yang modern, canggih dan inovatif sehingga memiliki potensi untuk menghasilkan hasil yang bermanfaat bagi masyarakat.

#### 1.4.3 Manfaat bagi masyarakat

Penelitian ini dapat menemukan senyawa tanaman pegagan (*Centella asiatica*) yang memiliki potensi sebagai obat baru untuk

pengobatan *tuberculosis*. Hal ini dapat membantu meningkatkan angka kesembuhan pasien *tuberculosis*. Tanaman pegagan (*Centella asiatica*) merupakan salah satu tanaman yang mudah dibudidayakan dan harganya relatif murah. Hal ini dapat meningkatkan ketersediaan obat antituberkulosis yang lebih murah dan terjangkau, sehingga dapat membantu meningkatkan akses masyarakat terhadap obat antituberkulosis.

### 1.5 Keaslian Penelitian

Tabel 1.1 Keaslian Penelitian

Nama peneliti, Tahun penelitian	Judul Penelitian	Metode Penelitian	Hasil Penelitian	Perbedaan dan Persamaan dengan Penelitian ini
(Endriyatno & Walid, 2022)	Studi <i>In silico</i> Kandungan Senyawa Daun Srikaya ( <i>Annona squamosa L.</i> ) Terhadap Protein <i>Dihydrofolate reductase</i> Pada <i>Mycobacterium tuberculosis</i>	<i>Docking molecular (In silico)</i>	<i>Anonaine</i> , <i>asimilobine</i> , dan <i>corypalmine</i> adalah senyawa kimia yang mungkin memiliki kemanjuran antituberculosis berdasarkan penelitian <i>in silico</i> .	Perbedaan: Tanaman yang digunakan. Pada penelitian ini menggunakan tanaman pegagan ( <i>Centella asiatica</i> ), sedangkan pada penelitian tersebut menggunakan daun srikaya ( <i>Annona squamosa L.</i> )  Persamaan: metode yaitu <i>Docking molecular</i> dan target protein yang digunakan yaitu <i>Dihydrofolate reductase</i>
(Puspitasari <i>et al.</i> , 2022)	<i>Molecular Docking</i> Senyawa	<i>Docking molecular (in silico)</i>	Senyawa caboxamycin memiliki	Perbedaan: Senyawa yang digunakan. Pada penelitian kali ini

Nama peneliti, Tahun penelitian	Judul Penelitian	Metode Penelitian	Hasil Penelitian	Perbedaan dan Persamaan dengan Penelitian ini
	Caboxamycin pada <i>Mycobacterium tuberculosis Polyketide synthase 13</i> (Pks13)		mekanisme <i>molecular</i> dalam menghambat protein <i>Pks13</i> . Caboxamycin memiliki potensi sebagai antituberkulosis secara <i>in silico</i> karena membentuk ikatan hidrogen.	menggunakan senyawa tanaman pegagan, sedangkan pada penelitian tersebut menggunakan senyawa Caboxamycin  Persamaan: Metode yang digunakan yaitu <i>Docking molecular</i> dan target protein yang digunakan yaitu <i>Polyketide synthase 13</i> (Pks13).
(Rimporok A et al., 2020)	Uji Anti Bakteri Ekstrak Daun Tanaman Kaki Kuda ( <i>Centella asiatica L. Urban</i> ) sebagai Tumbuhan Obat <i>Anti tuberkulosis</i>	Dilusi cair	Bakteri <i>Mycobacterium tuberculosis</i> dapat dihambat namun tidak dapat dibunuh menggunakan ekstrak daun tanaman pegagan atau kaki kuda ( <i>Centella asiatica L. Urban</i> ).	Perbedaan: Metode. Pada penelitian ini menggunakan metode <i>Docking molecular</i> , sedangkan pada penelitian tersebut menggunakan metode dilusi cair  Persamaan: Tanaman yang digunakan yaitu pegagan ( <i>Centella asiatica</i> ) dan bakteri yang digunakan yaitu <i>Mycobacterium tuberculosis</i>

Nama peneliti, Tahun penelitian	Judul Penelitian	Metode Penelitian	Hasil Penelitian	Perbedaan dan Persamaan dengan Penelitian ini
(Yusran <i>et al.</i> , 2016)	Bioaktivitas Ekstrak Metanol Daun Pegagan ( <i>Centella asiatica</i> L.) Terhadap Pertumbuhan Bakteri <i>Mycobacterium Tuberculosis</i>	Observasi mikroskopik kerentanan obat (MODS) menggunakan plat petri 24 <i>hole</i> .	Ekstrak metanol dari daun pegagan hijau dan daun pegagan merah dapat menghentikan pertumbuhan bakteri <i>M. tuberculosis</i> .	<p>Perbedaan: Metode. Pada penelitian ini menggunakan metode <i>Docking molecular</i>, sedangkan pada penelitian tersebut menggunakan metode observasi mikroskopik kerentanan obat (MODS)</p> <p>Persamaan: Tanaman yang digunakan yaitu pegagan (<i>Centella asiatica</i>) dan bakteri yang digunakan yaitu <i>Mycobacterium tuberculosis</i></p>

## DAFTAR PUSTAKA

- Adawiyah, R., Maimunah, S., & Rosawanti, P. (2019). *Keanekaragaman Tumbuhan Potensi Obat Tradisional di Hutan Kerangas Pasir Putih KHDTK UM Palangkaraya*. 2(1). <https://doi.org/10.32734/anr.v2i1.576>
- Aggarwal, A., Parai, M. K., Shetty, N., Wallis, D., Woolhiser, L., Hastings, C., Dutta, N. K., Galaviz, S., Dhakal, R. C., Shrestha, R., Wakabayashi, S., Walpole, C., Matthews, D., Floyd, D., Scullion, P., Riley, J., Epemolu, O., Norval, S., Snavely, T., ... Sacchettini, J. C. (2017). Development of a Novel Lead that Targets M. tuberculosis Polyketide Synthase 13. *Cell*, 170(2), 249-259.e25. <https://doi.org/10.1016/j.cell.2017.06.025>
- Agus, A. S. R., Purnaningtyas, S. R. D., Wahidin, Sari, D. R. T., Ischak, N. I., Gianti, L., & Cahyanto, H. N. (2022). *Kimia Medisinal*.
- Allo, V. L., Rahmah, S., & Gunawan, R. (2023). Studi Molecular Docking Senyawa Turunan Auron Sebagai Inhibitor Glikoprotein Spike Sars-Cov-2. *Akta Kimia Indonesia*, 8(2), 126. <https://doi.org/10.12962/j25493736.v8i2.16827>
- Artinda, S. A. (2016). Kajian Docking 3-[(Asetiloksi)Metil]-7-[(4-Hidroksi-3-Metoksifenil)Metilidin]Amino]-8-Okso-5-Thia-1-Azabisiklo[4.2.0]Oct-2-Ene-Asam Karboksilat Menggunakan Dock6. *Universitas Gajah Mada Yogyakarta*, 1–13. [http://eprints.ums.ac.id/42350/1/NASKAH\\_PUBLIKASI.pdf](http://eprints.ums.ac.id/42350/1/NASKAH_PUBLIKASI.pdf)
- BPOM. (2014). Pedoman Uji Toksisitas Nonklinis Secara In Vivo. *Badan Pengawas Obat Dan Makanan Republik Indonesia*.
- Brunner, & Suddarth. (2016). Keperawatan Medikal Bedah. *Jakarta: EGC*, 8.
- Dewi, R. D. C. (2023). Edukasi Untuk Mencegah Penyakit Tuberculosis (TBC) Di Kalangan Masyarakat Banjarsengon Kecamatan Patrang, Jember, Jawa Timur. *Jurnal Inspirasi Mengabdi Untuk Negeri*, 2(4), 2–8.
- Drwal, M. N., Banerjee, P., Dunkel, M., Wettig, M. R., & Preissner, R. (2014).

ProTox: a web server for the in silico prediction of rodent oral toxicity. *Nucleic Acids Research*, 42(W1), W53–W58. <https://doi.org/10.1093/nar/gku401>

Dwi, D. K., Sasongkowati, R., & Haryanto, E. (2020). Studi in Silico Sifat Farmakokinetik, Toksisitas, Dan Aktivitas Imunomodulator Brazilein Kayu Secang Terhadap Enzim 3-Chymotrypsin-Like Cysteine Protease Coronavirus. *Journal of Indonesian Medical Laboratory and Science (JoIMedLabS)*, 1(1), 76–85. <https://doi.org/10.53699/joimedlabs.v1i1.14>

Endriyatno, N. C., & Walid, M. (2022). Studi In Silico Kandungan Senyawa Daun Srikaya (*Annona squamosa* L.) Terhadap Protein Dihydrofolate Reductase Pada *Mycobacterium tuberculosis*. *Pharmacon: Jurnal Farmasi Indonesia*, 19(1), 87–98. <https://doi.org/10.23917/pharmacon.v19i1.18044>

Ferwadi, S., Rahmat, G., & Astuti, W. (2017). Molecular Docking Study of Cinnamate Acid Compound and its Derivatives as Protein 1J4X Inhibitor to Cervical Cancer Cell. *Jurnal Kimia Mulawarman*.

Filgueira, Walter, & Jr, A. (2019). Docking Screens for Drug Discovery. *Germany: Springer New York*.

FMIPA. (2020). *Sebanyak 80 Persen Tanaman Obat Dunia Ada di Indonesia*.

Guno, T. H., Putra, B. A., Kamelia, T., & Makmun, D. (2017). Diagnostic and Therapeutic Approach in Intestinal Tuberculosis. *The Indonesian Journal of Gastroenterology*, 134.

Hardjono, S. (2015). Prediksi Sifat Farmakokinetik, Toksisitas dan Aktivitas Sitotoksik Turunan N-Benzoil-N'-(4-fluorofenil)tiourea sebagai Calon Obat Antikanker melalui Pemodelan Molekul (Prediction of Pharmacokinetic Properties, Toxicity and Derivatives as Anticancer Drugs . *Jurnal Ilmu Kefarmasian Indonesia*, 14(2), 246–255. <https://cactus.nci>.

Ika. (2020). *Indonesia Belum Miliki Indeks Biodiversitas Nasional*.

Imam, M., & Siregar, T. (2015). Mekanisme Resistensi Isoniazid & Mutasi Gen

KatG Ser315Thr (G944C) Mycobacterium tuberculosis Sebagai Penyebab Tersering Resistensi Isoniazid. *Jmj*, 3(2), 119–131.

Jasmansyah, J., Fitriyani, P., Sujono, H., & Aisyah, L. S. (2020). Uji Aktivitas Antimikroba Minyak Atsiri Tanaman Pegagan (*Centella asiatica* (L.) Urb). *Jurnal Kartika Kimia*, 3(1), 43–47. <https://doi.org/10.26874/jkk.v3i1.54>

Kemenkes RI. (2020). Pedoman Nasional Pelayanan Kedokteran Tata Laksana Tuberkulosis. *Kementrian Kesehatan RI*.

Kemenkes RI. (2024). *Peringatan Hari Tuberkulosis Sedunia 2024: Gerakan Indonesia Akhiri Tuberkulosis (GIAT)*. <https://tbindonesia.or.id/peringatan-hari-tuberkulosis-sedunia-2024-gerakan-indonesia-akhiri-tuberkulosis-giat/>

Kenedyanti, E., & Sulistyorini, L. (2017). Analisis Mycobacterium Tuberculosis Dan Kondisi Fisik Rumah Dengan Kejadian Tuberkulosis Paru. *Jurnal Berkala Epidemiologi*, 5(2), 152–162. <https://doi.org/10.20473/jbe.v5i2.2017.152-162>

Kesuma, D., Siswandono, S., Purwanto, B. T., & Hardjono, S. (2018). Uji in silico Aktivitas Sitotoksik dan Toksisitas Senyawa Turunan N-(Benzoil)-N'-feniltiourea Sebagai Calon Obat Antikanker. *JPSCR: Journal of Pharmaceutical Science and Clinical Research*.

Kim, S., Chen, J., Cheng, T., Gindulyte, A., He, J., He, S., Li, Q., Shoemaker, B. A., Thiessen, P. A., Yu, B., Zaslavsky, L., Zhang, J., & Bolton, E. E. (2022). PubChem 2023 update. *Nucleic Acids Research*, 51(D1), D1373–D1380. <https://doi.org/10.1093/nar/gkac956>

Kristini, T., & Hamidah, R. (2020). Potensi Penularan Tuberculosis Paru pada Anggota Keluarga Penderita. *Jurnal Kesehatan Masyarakat Indonesia*, 15(1), 24. <https://doi.org/10.26714/jkmi.15.1.2020.24-28>

Kumar, A., Guardia, A., Colmenarejo, G., Pérez, E., Gonzalez, R. R., Torres, P., Calvo, D., Gómez, R. M., Ortega, F., Jiménez, E., Gabarro, R. C., Rullás, J., Ballell, L., & Sherman, D. R. (2015). A Focused Screen Identifies Antifolates

- with Activity on Mycobacterium tuberculosis. *ACS Infectious Diseases*, 1(12), 604–614. <https://doi.org/10.1021/acsinfecdis.5b00063>
- Lin, Y., & Gerson, S. L. (2014). Clinical Trials Using LV-P140K-MGMT for Gliomas. In E. C. Lattime & S. L. Gerson (Eds.), *Gene Therapy of Cancer (Third Edition)* (Third Edit, pp. 379–391). Academic Press. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/B978-0-12-394295-1.00026-3>
- Morris, G. M., Huey, R., Lindstrom, W., Sanner, M. F., Belew, R. K., Goodsell, D. S., & Olson, A. J. (2009). AutoDock4 and AutoDockTools4: Automated docking with selective receptor flexibility. *Journal of Computational Chemistry*, 30(16), 2785–2791. <https://doi.org/10.1002/jcc.21256>
- Mushebenge, A. G. A., Ugbaja, S. C., Mbatha, N. A., B. Khan, R., & Kumalo, H. M. (2023). Assessing the Potential Contribution of In Silico Studies in Discovering Drug Candidates That Interact with Various SARS-CoV-2 Receptors. *International Journal of Molecular Sciences*, 24(21). <https://doi.org/10.3390/ijms242115518>
- Nakamura, Y., Asahi, H., Altaf-Ul-Amin, M., Kurokawa, K., & Kanaya, S. (2024). *KNApSAcK: A Comprehensive Species-Metabolite Relationship Database*. <http://www.knapsackfamily.com/KNApSAcK/>
- Naufa, F., Mutiah, R., Yen, Y., & Indrawijaya, A. (2022). Studi in Silico Potensi Senyawa Katekin Teh Hijau (*Camellia sinensis*) sebagai Antivirus SARS CoV-2 terhadap Spike Glycoprotein (6LZG) dan Main Protease (5R7Y). *J.Food Pharm.Sci*, 2022(1), 584–596. [www.journal.ugm.ac.id/v3/JFPA](http://www.journal.ugm.ac.id/v3/JFPA)
- Ningrat, A., & Wahyu, S. (2022). *Docking Molekuler Senyawa Brazilein Herba Caesalpina Sappanis Lignum Pada Mycobacterium Tuberculosis Inha Sebagai Antituberkulosis*. 1(1), 29–34.
- North, E. J., Jackson, M., & Lee, R. E. (2014). New approaches to target the mycolic acid biosynthesis pathway for the development of tuberculosis therapeutics. *Current Pharmaceutical Design*, 20(27), 4357–4378.

<https://doi.org/10.2174/1381612819666131118203641>

Pinzi, L., & Rastelli, G. (2019). Molecular Docking: Shifting Paradigms in Drug Discovery. *International Journal of Molecular Sciences*, 20(18). <https://doi.org/10.3390/ijms20184331>

Pires, D. E. V., Blundell, T. L., & Ascher, D. B. (2015). *pkCSM: Predicting Small-Molecule Pharmacokinetic and Toxicity Properties Using Graph-Based Signatures*. <https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.5b00104>

PPN. (2021). Buku Saku SDGs. *Jakarta: Bappenas*.

Pratama, A. A., Rifai, Y., & Marzuki, A. (2017). DOCKING MOLEKULER SENYAWA 5,5'DIBROMOMETILSESAMIN. *Majalah Farmasi Farmakologi Fakultas Farmasi Makassar*, 21(3), 67–69.

Puspita, P. J., Liliyani, N. P. P., & Ambarsari, L. (2022). In Silico Analysis of Active Compounds of Avocado Fruit (*Persea americana* Mill.) as Tyrosinase Enzyme Inhibitors. *Current Biochemistry*, 9(2), 73–87. <https://doi.org/10.29244/cb.9.2.3>

Puspitasari, L., Sumiyati Nur Aripin, I., Putri Setyaningsih, E., Kahfi, M. I., Sawah, S., Jagakarsa, K., Jakarta Selatan, K., & Khusus Ibukota Jakarta, D. (2022). *Molecular Docking Senyawa Caboxamycin Pada Mycobacterium tuberculosis Polyketide Synthase 13 (Pks13)*. 15(2). <https://www.rcsb.org/pdb>.

Rachmania, R. A., Supandi, S., & Cristina, F. A. D. (2016). Analisis Penambatan Molekul Senyawa Flavonoid Buah Mahkota Dewa (*Phaleria Macrocarpa* (Scheff.) Boerl.) Pada Reseptor  $\alpha$ -Glukosidase Sebagai Antidiabetes. *Pharmacy: Jurnal Farmasi Indonesia*, 13(02).

Raharjo, S. (2018). *Cara Uji Kruskal Wallis Statistik Non Parametrik dengan SPSS*. <https://www.spssindonesia.com/2018/11/uji-kruskal-wallis-dengan-spss.html>

Ramandey, J. M., & Pelipus, B. (2020). Identifikasi Tanaman Pegagan (*Centela asiatica* L.) Sebagai Tanaman Obat Bagi Masyarakat Suku Mee Di Distrik Tigi

Timur Kabupaten Deiyai. *Fakultas Pertanian Dan Peternakan Universitas Satya Wiyata Mandala Nabire*.

RCSB PDB. (2015). *Guide to Understanding PDB Data*. Molecular Explorations through Biology and Medicine. <https://pdb101.rcsb.org/learn/guide-to-understanding-pdb-data/r-value-and-r-free>

Rimporok A, Budiarmo F, & Fatimawali. (2020). Uji anti bakteri ekstrak daun tanaman Kaki kuda (*Centella asiatica* L. Urban) sebagai tumbuhan obat anti tuberkulosis. *Jurnal Biomedik*, 12(1), 31–37.

Riyaldi, M. R., Fatiya, N. U., Dipadharma, R. H. F., Kusnadi, I. F., Hidayat, S., Suhandi, C., & Muchtaridi. (2022). *Studi In-Silico Senyawa Pada Ekstrak Bawang Putih (Allium sativum L.) Sebagai Inhibitor Neuraminidase Pada Influenza*. 20, 1–11.

Sari, I. W., Junaidin, J., & Pratiwi, D. (2020). Studi Molecular Docking Senyawa Flavonoid Herba Kumis Kucing (*Orthosiphon stamineus* B.) Pada Reseptor A-Glukosidase Sebagai Antidiabetes Tipe 2. *Jurnal Farmagazine*, 7(2), 54. <https://doi.org/10.47653/farm.v7i2.194>

Smeltzer, S. ., & Bare Brenda, B. . (2015). Keperawatan Medikal Bedah. *Jakarta : EGC*.

Sugiarti, S. S. E., Ramadhian, M. R., & Carolia, N. (2018). *Vitamin D sebagai Suplemen dalam Terapi Tuberkulosis Paru*. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:58100168>

Susanti, N. M. P., Laksmiani, N. P. L., Noviyanti, N. K. M., Arianti, K. M., & Duantara, I. K. (2019). Molecular Docking Terpinen-4-Ol Sebagai Antiinflamasi Pada Aterosklerosis Secara in Silico. *Jurnal Kimia*, 221. <https://doi.org/10.24843/jchem.2019.v13.i02.p16>

Sutardi, S. (2017). Kandungan Bahan Aktif Tanaman Pegagan dan Khasiatnya untuk Meningkatkan Sistem Imun Tubuh. *Jurnal Penelitian Dan Pengembangan Pertanian*, 35(3), 121.

<https://doi.org/10.21082/jp3.v35n3.2016.p121-130>

- Tapriory, A. A., Pertiwi, K. O., Fadilla, K., Reyhanditya, D., & Fatchiyah, F. (2020). In-Silico Analysis of Methoxyl Pectin Compounds from Banana Peels as HMG-CoA Reductase Inhibitor Complexes. *JSMARTech*.
- Torres, J. N., Paul, L. V, Rodwell, T. C., Victor, T. C., Amallraja, A. M., Elghraoui, A., Goodmanson, A. P., Ramirez-Busby, S. M., Chawla, A., Zadorozhny, V., Streicher, E. M., Sirgel, F. A., Catanzaro, D., Rodrigues, C., Gler, M. T., Crudu, V., Catanzaro, A., & Valafar, F. (2015). Novel katG mutations causing isoniazid resistance in clinical M. tuberculosis isolates. *Emerging Microbes & Infections*, 4(7), e42. <https://doi.org/10.1038/emi.2015.42>
- Unissa, A. N., Subbian, S., Hanna, L. E., & Selvakumar, N. (2016). Overview on mechanisms of isoniazid action and resistance in Mycobacterium tuberculosis. *Infection, Genetics and Evolution*.
- USDA, N. (2024). *The Plant Database*. National Plant Data Team, Greensboro, NC USA.
- Wati, W., Widodo, G. P., & Herowati, R. (2020). Prediction of Pharmacokinetics Parameter and Molecular Docking Study of Antidiabetic Compounds from Syzygium polyanthum and Syzygium cumini. *Jurnal Kimia Sains Dan Aplikasi*.
- WHO. (2023). *Global Tuberculosis Report: Drug-resistant TB*. <https://www.who.int/teams/global-tuberculosis-programme/tb-reports/global-tuberculosis-report-2023/tb-disease-burden/1-3-drug-resistant-tb>
- Wilapangga, A., Sari, S. W., & Fatwami, E. F. (2023). Analisis Potensi Farmakokinetik Dan Toksisitas Kandidat Obat Dari Ekstrak Daun Salam ( *Syzygium polyanthum* ) Sebagai Antioksidan Secara *In Silico*. *Jurnal Bina Cipta Husada Vol. XIX, XIX(1)*, 47–54.
- Wróbel, A., Arciszewska, K., Maliszewski, D., & Drozdowska, D. (2020). Trimethoprim and other nonclassical antifolates an excellent template for

- searching modifications of dihydrofolate reductase enzyme inhibitors. *The Journal of Antibiotics*, 5–27. <https://doi.org/10.1038/s41429-019-0240-6>
- wwPDB consortium. (2018). Protein Data Bank: the single global archive for 3D macromolecular structure data. *Nucleic Acids Research*, 47(D1), D520–D528. <https://doi.org/10.1093/nar/gky949>
- Yang, W., Gadgil, P., Krishnamurthy, V. R., Landis, M., Mallick, P., Patel, D., Patel, P. J., Reid, D. L., & Sanchez-Felix, M. (2020). The Evolving Druggability and Developability Space: Chemically Modified New Modalities and Emerging Small Molecules. *The AAPS Journal*, 22(2), 21. <https://doi.org/10.1208/s12248-019-0402-2>
- Yu, M., Dou, C., Gu, Y., & Cheng, W. (2018). Crystallization And Structure Analysis Of The Core Motif Of The Pks13 Acyltransferase Domain From *Mycobacterium tuberculosis*. *PeerJ*.
- Yusran, Asriani, I., & Asri saleh, H. (2016). *Bioaktivitas Ekstrak Metanol Daun Pegagan ( Centella Asiatica L .) Terhadap Pertumbuhan Bakteri Mycobacterium Tuberculosis*. 4, 54–61.
- Zhang, Y., Chowdhury, S., Rodrigues, J. V, & Shakhnovich, E. (2021). *Development of antibacterial compounds that constrain evolutionary pathways to resistance*. 1–29.

# LAMPIRAN



Lampiran 1. Surat Pernyataan Tidak Menggunakan Etik Penelitian

**UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH GOMBONG**  
**FAKULTAS ILMU KESEHATAN**  
**PROGRAM STUDI FARMASI PROGRAM SARJANA**  
Jl. Yos Sudarso No. 461 Gombong, Kebumen 54412 Telp./Fax. (0287) 472433, 473750  
Website : [www.unimugo.ac.id](http://www.unimugo.ac.id) Email : [sfarmasi@unimugo.ac.id](mailto:sfarmasi@unimugo.ac.id)

---

**SURAT PERNYATAAN  
TIDAK MENGGUNAKAN ETIK PENELITIAN**

*Assalamu'alaikum Wr Wb*

Saya yang bertanda tangan dibawah ini :

Nama : Hanif Adi Prayoga  
NIM : C12020019  
Program Studi : Farmasi Program Sarjana  
Judul Penelitian : ANALISIS *MOLECULAR DOCKING* POTENSI SENYAWA  
PEGAGAN (*Centella asiatica*) SEBAGAI PENGOBATAN TBC  
PARU DENGAN MENGHAMBAT BAKTERI *Mycobacterium tuberculosis*

Menerangkan bahwa penelitian yang saya lakukan tidak bersinggungan dengan subyek yang berkaitan dengan manusia ataupun hewan.  
Demikian surat pernyataan ini saya buat dengan sebenar-benarnya dan untuk dipergunakan sebagai salah satu persyaratan ujian hasil penelitian (*skripsi*). Terimakasih

*Wassalamu'alaikum wr wb*


Mengetahui,  
Dosen Pembimbing I

  
Sugeng Supriyanto, M.S.Farm  
NIDN. 0604108606



















Gombong, 8 Agustus 2024  
Peneliti

  
Hanif Adi Prayoga  
C12020019

Lampiran 2. Lembar Bimbingan


	<b>UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH GOMBONG</b>	Nomor	: PDN-SKP/12/005
		Revisi ke	: 02
		Tgl. Terbit	18 Agustus 2020
		Halaman	


Nama mahasiswa : Hanif Adi Prayoga  
 NIM : C12020019  
 Pembimbing : Sugeng Supriyanto, M.S.Farm

Tanggal Bimbingan	Topik/Materi Bimbingan	Paraf Mahasiswa	Paraf Pembimbing
11 Desember 2023	Pembahasan konsep penelitian		
10 Januari 2024	Revisi bab 1		
19 Januari 2024	Revisi bab 1 dan bab 2		
31 Januari 2024	Revisi bab 2 dan bab 3		
1 Februari 2024	ACC bab 1, 2 dan 3		
8 Juli 2024	Konsultasi preparasi penelitian		
15 Juli 2024	Konsultasi hasil		
31 Juli 2024	hasil dan pembahasan		
6 Agustus 2024	Revisi hasil dan pembahasan		






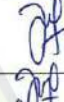

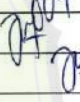



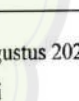
Gombong, 8 Agustus 2024

Mengetahui  
 Ketua Program Studi Farmasi

  
 apt. Naelaz Zukhruf WK, M.Pharm.Sci  
 NIDN. 0618109202

	<b>UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH GOMBONG</b>	Nomor	: PDN-SKP/12/005
		Revisi ke	: 02
		Tgl. Terbit	18 Agustus 2020
		Halaman	

**Nama mahasiswa** : Hanif Adi Prayoga  
**NIM** : C12020019  
**Pembimbing** : apt. Naelaz Zukhruf WK, M.Pharm.Sci

Tanggal Bimbingan	Topik/Materi Bimbingan	Paraf Mahasiswa	Paraf Pembimbing
11 Desember 2023	Acc Judul Penelitian		
3 Februari 2024	Revisi bab 1, 2 dan 3		
13 Februari 2024	Acc bab 1, 2 dan 3		
8 Agustus 2024	Konsultasi hasil dan pembahasan.		
9 Agustus 2024	Revisi hasil dan pembahasan		
5 Agustus 2024	ACC Bab 1,2,3,4 & 5		

Gombong, 8 Agustus 2024

Mengetahui  
Ketua Program Studi Farmasi

  
 apt. Naelaz Zukhruf WK, M.Pharm.Sci  
 NIDN. 0618109202

Lampiran 3. Surat Pernyataan Cek Similarity/Plagiasi



SURAT PERNYATAAN CEK SIMILARITY/PLAGIASI

Yang bertanda tangan di bawah ini:


Nama : Sawiji, M.Sc  
NIK : 96009  
Jabatan : Kepala UPT Perpustakaan, Multimedia, SIM, dan IT

Menyatakan bahwa karya tulis di bawah ini **sudah lolos** uji cek similarity/plagiasi:

Judul : ANALISIS MOLECULAR DOCKING POTENSI SENYAWA  
PEGAGAN (*Centella asiatica*) SEBAGAI PENGOBATAN TBC PARU  
DENGAN MENGHAMBAT BAKTERI *Mycobacterium tuberculosis*  
Nama : Hanif Adi Prayoga  
NIM : C12020019  
Program Studi : S1 Farmasi  
Hasil Cek : 23%

Gombong, 27 Juli 2024

Pustakawan

  
(Aulia Rahmahanti u.i.s.i.p)

Mengetahui,  
Kepala UPT Perpustakaan, Multimedia, SIM, dan IT



(Sawiji, M.Sc)

**Lampiran 4.** Hasil Perhitungan Kesamaan Residu Asam Amino

c	Senyawa	Residu	Kesamaan Residu	Perhitungan	Hasil
1.	<i>Asiaticin-4KM2</i>	GLY 97, ASP 27, ALA 7, ALA 126, ILE 14, ILE 5	ALA 7, ASP 27, ILE 5	$\frac{3}{5} \times 100\%$	60%
	Pembanding Isoniazid-4KM2	ALA 7, ASP 27, THR 113, ILE 5, TRP 6			
2.	<i>Beta Caryophylle ne-4KM2</i>	ILE 14, TYR 100, ILE 20, TRP 6, ILE 5, ALA 7, PHE 31, ILE 94	TRP 6, ILE 5, ALA 7	$\frac{3}{5} \times 100\%$	60%
	Pembanding Isoniazid-4KM2	ALA 7, ASP 27, THR 113, ILE 5, TRP 6			
3.	<i>Centellin-4KM2</i>	ILE 94, PHE 31, HIS 30, ILE 5, LEU 50, TRP 6, ASP 27	ILE5, TRP 6, ASP 27	$\frac{3}{5} \times 100\%$	60%
	Pembanding Isoniazid-4KM2	ALA 7, ASP 27, THR 113, ILE 5, TRP 6			
4.	<i>Asiaticin-5V3Y</i>	ILE 1643, ALA 1561, VAL 1562, VAL 1537, ALA 1477, TRP 1532, SER 1533	ILE 1643, ALA 1561, VAL 1562, SER 1533	$\frac{4}{6} \times 100\%$	66,67%
	Pembanding Isoniazid-5V3Y	TYR 1663, VAL 1562, ALA 1561, ILE 1643, SER 1533, ARG 1563			
5.	<i>Beta Caryophylle ne-5V3Y</i>	ALA 1477, HIS 1699, ALA 1561, ILE 1643, TYR 1663, TYR 1674,	ALA 1561, ILE 1643, TYR 1663	$\frac{3}{6} \times 100\%$	50%
	Pembanding Isoniazid-5V3Y	TYR 1663, VAL 1562, ALA 1561, ILE 1643, SER 1533, ARG 1563			
6.	<i>Centellin-5V3Y</i>	PRO 1476, TRP 1532, TYR 1663, VAL 1562, ASP 1560, ALA 1561, VAL 1537, ILE 1643, TYR 1674, HIS 1699, ALA 1477	TYR 1663, VAL 1562, ALA 1561, ILE 1643	$\frac{4}{6} \times 100\%$	66,67%
	Pembanding Isoniazid-5V3Y	TYR 1663, VAL 1562, ALA 1561, ILE 1643, SER 1533, ARG 1563			

Keterangan : Rumus % Kesamaan residu :  $\frac{\text{Jumlah Residu yang Sama}}{\text{Jumlah Residu Kontrol Pembanding}} \times 100\%$

**Lampiran 5.** Hasil *Binding affinity* Analisis *Docking*

1. *Binding affinity Asiaticin-4KM2*

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	1	-6.99	0.00	23.38	RANKING
1	2	34	-6.89	0.62	23.52	RANKING
1	3	46	-6.86	0.49	23.25	RANKING
1	4	64	-6.63	0.61	23.31	RANKING
1	5	10	-6.37	1.48	23.66	RANKING
1	6	36	-6.33	1.32	23.45	RANKING
1	7	41	-6.28	1.13	23.11	RANKING
1	8	44	-6.16	1.98	22.29	RANKING
1	9	48	-6.12	1.32	22.61	RANKING
1	10	63	-6.09	1.06	23.19	RANKING
1	11	27	-5.84	1.61	22.88	RANKING
1	12	94	-5.74	1.23	23.24	RANKING
1	13	83	-5.58	1.30	22.70	RANKING
1	14	84	-5.52	1.26	22.97	RANKING
2	1	32	-6.51	0.00	23.24	RANKING
2	2	87	-6.04	1.81	23.32	RANKING
2	3	93	-6.02	1.83	22.85	RANKING
2	4	25	-5.89	1.81	22.94	RANKING
2	5	21	-5.88	1.77	22.51	RANKING
2	6	13	-5.86	1.81	22.96	RANKING
2	7	50	-5.56	1.49	22.86	RANKING
2	8	39	-5.54	1.91	22.82	RANKING
2	9	72	-5.11	2.00	21.90	RANKING
3	1	11	-6.16	0.00	21.23	RANKING
3	2	78	-6.12	0.50	21.11	RANKING
3	3	18	-6.03	0.89	21.28	RANKING
3	4	76	-5.93	0.49	21.06	RANKING
3	5	98	-5.91	1.35	21.85	RANKING
3	6	97	-5.80	0.83	21.29	RANKING
3	7	65	-5.74	0.92	21.53	RANKING
4	1	17	-6.04	0.00	22.74	RANKING
4	2	92	-5.93	1.41	21.90	RANKING
4	3	20	-5.93	1.07	22.33	RANKING
4	4	89	-5.89	1.24	22.21	RANKING
4	5	26	-5.88	1.12	22.21	RANKING
4	6	54	-5.87	1.00	22.58	RANKING
4	7	67	-5.86	1.02	22.29	RANKING
4	8	19	-5.78	1.16	22.64	RANKING

4	9	60	-5.75	1.29	22.47	RANKING
4	10	37	-5.74	1.21	22.34	RANKING
4	11	74	-5.67	1.10	22.42	RANKING
4	12	49	-5.66	1.21	22.46	RANKING
4	13	9	-5.65	1.27	22.74	RANKING
4	14	58	-5.62	1.26	22.65	RANKING
4	15	12	-5.59	1.36	22.49	RANKING
4	16	31	-5.59	1.42	22.49	RANKING
4	17	40	-5.57	1.28	22.71	RANKING
4	18	52	-5.57	1.33	22.49	RANKING
4	19	85	-5.57	1.21	22.47	RANKING
4	20	45	-5.56	1.26	22.44	RANKING
4	21	61	-5.54	1.30	22.59	RANKING
4	22	90	-5.54	1.23	22.43	RANKING
4	23	16	-5.49	1.04	22.66	RANKING
4	24	71	-5.49	1.24	22.19	RANKING
4	25	15	-5.46	1.14	22.71	RANKING
4	26	22	-5.44	1.03	22.65	RANKING
4	27	69	-5.44	1.24	22.05	RANKING
4	28	91	-5.40	1.11	22.85	RANKING
4	29	30	-5.39	1.37	22.51	RANKING
4	30	6	-5.37	0.81	22.74	RANKING
4	31	2	-5.33	1.29	22.40	RANKING
4	32	8	-5.32	1.18	22.69	RANKING
4	33	5	-5.31	1.14	22.66	RANKING
4	34	73	-5.21	1.11	22.71	RANKING
4	35	95	-5.19	1.09	22.64	RANKING
4	36	3	-4.64	1.38	22.55	RANKING
5	1	47	-6.03	0.00	22.30	RANKING
5	2	53	-5.94	1.60	22.19	RANKING
5	3	57	-5.88	1.61	22.13	RANKING
5	4	96	-5.78	1.28	22.33	RANKING
5	5	62	-5.75	1.55	22.01	RANKING
5	6	55	-5.70	1.60	22.05	RANKING
5	7	81	-5.64	1.43	22.20	RANKING
5	8	35	-5.61	1.63	21.99	RANKING
5	9	75	-5.52	1.80	22.48	RANKING
5	10	79	-5.52	1.57	21.88	RANKING
5	11	51	-5.46	1.63	22.18	RANKING
5	12	29	-5.42	1.88	22.32	RANKING
5	13	43	-5.14	1.81	21.76	RANKING
6	1	100	-6.00	0.00	22.59	RANKING

6	2	99	-5.79	0.71	22.58	RANKING
6	3	70	-5.79	0.72	22.66	RANKING
6	4	56	-5.72	1.40	22.97	RANKING
6	5	4	-5.56	1.37	22.84	RANKING
6	6	66	-5.42	1.00	22.30	RANKING
6	7	23	-5.42	1.49	22.30	RANKING
6	8	28	-5.22	1.85	22.86	RANKING
7	1	80	-5.98	0.00	22.17	RANKING
7	2	86	-5.75	1.77	22.59	RANKING
7	3	88	-5.25	1.62	22.03	RANKING
8	1	59	-5.74	0.00	22.04	RANKING
8	2	38	-5.10	1.88	21.52	RANKING
8	3	68	-4.99	2.00	21.42	RANKING
9	1	14	-5.70	0.00	23.35	RANKING
9	2	42	-5.70	1.10	23.12	RANKING
9	3	7	-5.11	1.56	22.75	RANKING
10	1	24	-5.66	0.00	21.51	RANKING
11	1	82	-5.55	0.00	22.50	RANKING
12	1	33	-5.11	0.00	21.72	RANKING
13	1	77	-5.06	0.00	21.76	RANKING

## 2. Binding Affiniti Beta Caryophyllene-4KM2

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	4	-6.47	0.00	23.09	RANKING
1	2	8	-6.47	0.02	23.09	RANKING
1	3	20	-6.47	0.01	23.09	RANKING
1	4	6	-6.47	0.03	23.09	RANKING
1	5	58	-6.47	0.01	23.09	RANKING
1	6	39	-6.47	0.01	23.09	RANKING
1	7	15	-6.47	0.01	23.09	RANKING
1	8	79	-6.46	0.04	23.10	RANKING
1	9	18	-6.46	0.32	22.97	RANKING
1	10	23	-6.46	0.32	22.97	RANKING
1	11	76	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	12	74	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	13	83	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	14	69	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	15	47	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	16	30	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	17	38	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	18	24	-6.46	1.23	22.09	RANKING

1	19	77	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	20	97	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	21	61	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	22	32	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	23	46	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	24	29	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	25	27	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	26	93	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	27	31	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	28	95	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	29	45	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	30	14	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	31	94	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	32	66	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	33	50	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	34	43	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	35	71	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	36	63	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	37	16	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	38	11	-6.46	1.23	22.08	RANKING
1	39	96	-6.46	0.32	22.97	RANKING
1	40	28	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	41	78	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	42	35	-6.46	0.31	22.97	RANKING
1	43	51	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	44	2	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	45	12	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	46	13	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	47	52	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	48	5	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	49	82	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	50	37	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	51	48	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	52	1	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	53	55	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	54	90	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	55	81	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	56	92	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	57	22	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	58	72	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	59	73	-6.46	1.23	22.08	RANKING
1	60	34	-6.46	1.23	22.09	RANKING

1	61	87	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	62	100	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	63	64	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	64	68	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	65	19	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	66	75	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	67	57	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	68	26	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	69	65	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	70	86	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	71	60	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	72	59	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	73	3	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	74	40	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	75	53	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	76	88	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	77	21	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	78	33	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	79	98	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	80	80	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	81	70	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	82	25	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	83	49	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	84	44	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	85	42	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	86	67	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	87	91	-6.46	0.32	22.97	RANKING
1	88	56	-6.46	0.32	22.97	RANKING
1	89	99	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	90	41	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	91	84	-6.46	0.32	22.98	RANKING
1	92	85	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	93	89	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	94	7	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	95	9	-6.46	0.33	22.97	RANKING
1	96	36	-6.46	0.33	22.98	RANKING
1	97	10	-6.46	1.23	22.09	RANKING
1	98	62	-6.46	0.33	22.98	RANKING
1	99	54	-6.46	0.31	22.96	RANKING
1	100	17	-6.46	0.33	22.98	RANKING

### 3. Binding affinity Centellin-4KM2

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	55	-6.73	0.00	22.93	RANKING
1	2	73	-6.14	1.07	23.17	RANKING
1	3	97	-5.99	1.03	23.44	RANKING
1	4	82	-5.99	1.94	23.96	RANKING
1	5	88	-5.98	1.26	22.85	RANKING
1	6	67	-5.91	1.98	23.42	RANKING
1	7	13	-5.91	1.68	23.28	RANKING
1	8	68	-5.90	1.09	23.13	RANKING
1	9	35	-5.87	1.05	23.57	RANKING
1	10	76	-5.86	1.12	23.52	RANKING
1	11	38	-5.81	1.83	23.27	RANKING
1	12	66	-5.79	1.99	24.01	RANKING
1	13	15	-5.78	1.67	23.96	RANKING
1	14	49	-5.75	1.72	23.55	RANKING
1	15	58	-5.68	1.42	23.52	RANKING
1	16	2	-5.67	1.77	23.24	RANKING
1	17	18	-5.47	1.60	23.59	RANKING
1	18	30	-5.45	1.77	23.37	RANKING
2	1	1	-6.17	0.00	23.10	RANKING
2	2	78	-5.63	1.33	23.02	RANKING
2	3	100	-5.42	1.80	23.48	RANKING
2	4	79	-5.31	1.47	23.00	RANKING
2	5	36	-5.23	1.32	22.52	RANKING
2	6	4	-5.13	1.65	23.16	RANKING
2	7	51	-5.05	1.99	23.35	RANKING
2	8	77	-4.97	1.61	22.44	RANKING
2	9	27	-4.90	1.75	22.48	RANKING
2	10	71	-4.87	1.81	22.18	RANKING
2	11	61	-4.85	1.35	22.27	RANKING
2	12	3	-4.74	1.68	22.04	RANKING
3	1	23	-6.14	0.00	23.86	RANKING
3	2	26	-5.98	1.03	23.60	RANKING
4	1	85	-5.88	0.00	23.81	RANKING
4	2	47	-5.80	1.95	23.53	RANKING
4	3	50	-5.67	1.83	24.58	RANKING
5	1	34	-5.86	0.00	23.24	RANKING
6	1	39	-5.71	0.00	23.77	RANKING
6	2	12	-5.59	1.00	23.85	RANKING
6	3	8	-5.54	1.85	24.54	RANKING

6	4	17	-5.52	1.74	22.68	RANKING
6	5	65	-5.44	1.61	23.16	RANKING
6	6	95	-5.43	1.10	23.80	RANKING
6	7	6	-5.42	1.69	22.92	RANKING
6	8	99	-5.35	1.62	23.18	RANKING
6	9	7	-5.33	1.82	22.55	RANKING
6	10	32	-5.30	1.08	23.68	RANKING
6	11	56	-5.28	1.66	23.08	RANKING
6	12	9	-5.23	1.21	23.48	RANKING
6	13	37	-5.20	1.94	22.15	RANKING
6	14	54	-5.16	1.02	23.66	RANKING
6	15	72	-5.11	1.81	23.14	RANKING
6	16	46	-5.05	1.58	23.50	RANKING
6	17	70	-5.00	1.71	23.23	RANKING
6	18	64	-4.99	1.80	23.64	RANKING
6	19	57	-4.98	1.66	23.02	RANKING
6	20	52	-4.98	1.94	22.29	RANKING
6	21	74	-4.92	1.96	21.89	RANKING
6	22	86	-4.91	1.64	23.07	RANKING
6	23	5	-4.91	1.65	23.33	RANKING
6	24	25	-4.88	1.26	23.61	RANKING
6	25	41	-4.87	1.72	23.05	RANKING
6	26	75	-4.78	1.35	23.01	RANKING
6	27	93	-4.75	1.90	22.84	RANKING
7	1	89	-5.70	0.00	22.13	RANKING
7	2	33	-5.32	1.64	22.26	RANKING
7	3	87	-5.30	1.83	22.44	RANKING
7	4	59	-5.01	1.93	22.32	RANKING
7	5	83	-4.57	1.76	22.15	RANKING
8	1	45	-5.59	0.00	22.44	RANKING
8	2	28	-5.31	1.89	22.11	RANKING
8	3	42	-5.20	1.85	21.92	RANKING
8	4	90	-5.18	1.87	22.04	RANKING
8	5	24	-5.16	1.97	21.93	RANKING
8	6	94	-4.93	1.52	21.97	RANKING
8	7	92	-4.88	1.93	21.51	RANKING
8	8	14	-4.82	1.73	22.15	RANKING
8	9	43	-4.78	1.70	22.23	RANKING
8	10	40	-4.78	1.89	22.19	RANKING
8	11	63	-4.45	1.71	22.09	RANKING
9	1	48	-5.51	0.00	21.94	RANKING
9	2	31	-5.50	0.90	22.00	RANKING

9	3	96	-5.43	0.88	21.97	RANKING
9	4	80	-5.43	0.77	21.62	RANKING
9	5	98	-5.20	1.27	22.44	RANKING
9	6	44	-5.17	1.22	22.01	RANKING
9	7	22	-5.12	1.42	22.14	RANKING
9	8	19	-5.11	0.98	22.44	RANKING
9	9	91	-5.05	1.05	22.33	RANKING
9	10	81	-5.04	1.21	22.06	RANKING
9	11	84	-5.00	1.23	22.23	RANKING
9	12	21	-4.87	1.67	22.70	RANKING
9	13	60	-4.78	1.26	22.49	RANKING
9	14	11	-4.66	1.30	22.53	RANKING
9	15	29	-4.62	1.34	22.53	RANKING
10	1	62	-5.39	0.00	22.85	RANKING
10	2	10	-5.23	1.03	22.20	RANKING
11	1	16	-5.36	0.00	23.75	RANKING
11	2	69	-5.08	1.20	23.26	RANKING
12	1	53	-5.18	0.00	23.53	RANKING
12	2	20	-5.03	1.63	22.67	RANKING

#### 4. *Binding affinity* Isoniazid-4KM2

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	30	-4.88	0.00	26.25	RANKING
1	2	55	-4.84	0.21	26.20	RANKING
1	3	6	-4.84	0.20	26.26	RANKING
1	4	61	-4.83	0.22	26.25	RANKING
1	5	4	-4.82	0.25	26.24	RANKING
1	6	15	-4.80	0.26	26.23	RANKING
1	7	63	-4.69	0.52	26.14	RANKING
1	8	29	-4.68	1.43	26.22	RANKING
1	9	27	-4.68	1.41	26.24	RANKING
1	10	2	-4.68	1.44	26.22	RANKING
1	11	33	-4.67	1.41	26.23	RANKING
1	12	86	-4.67	1.40	26.27	RANKING
1	13	96	-4.67	1.40	26.26	RANKING
1	14	91	-4.67	1.39	26.28	RANKING
1	15	39	-4.67	1.42	26.24	RANKING
1	16	12	-4.66	0.78	25.91	RANKING
1	17	48	-4.65	0.62	26.06	RANKING
1	18	57	-4.63	1.42	26.15	RANKING
1	19	43	-4.60	1.45	26.06	RANKING

1	20	42	-4.50	1.42	26.06	RANKING
2	1	67	-4.77	0.00	25.55	RANKING
2	2	77	-4.77	0.03	25.54	RANKING
2	3	94	-4.76	0.06	25.54	RANKING
2	4	97	-4.76	0.08	25.52	RANKING
2	5	74	-4.76	0.11	25.53	RANKING
2	6	19	-4.76	0.10	25.54	RANKING
2	7	36	-4.76	0.09	25.54	RANKING
2	8	8	-4.75	0.13	25.49	RANKING
2	9	17	-4.75	0.11	25.53	RANKING
2	10	82	-4.75	0.08	25.56	RANKING
2	11	64	-4.75	0.05	25.55	RANKING
2	12	100	-4.75	0.08	25.52	RANKING
2	13	52	-4.75	0.09	25.52	RANKING
2	14	98	-4.74	0.15	25.52	RANKING
2	15	90	-4.74	0.10	25.54	RANKING
2	16	73	-4.74	0.10	25.53	RANKING
2	17	62	-4.74	0.11	25.55	RANKING
2	18	5	-4.74	0.12	25.55	RANKING
2	19	37	-4.74	0.14	25.52	RANKING
2	20	84	-4.73	0.10	25.56	RANKING
2	21	28	-4.73	0.09	25.57	RANKING
2	22	51	-4.67	0.22	25.57	RANKING
2	23	65	-4.67	0.77	25.85	RANKING
2	24	41	-4.67	0.27	25.50	RANKING
2	25	40	-4.67	1.09	25.94	RANKING
2	26	14	-4.67	1.07	25.96	RANKING
2	27	92	-4.67	1.07	25.97	RANKING
2	28	18	-4.66	0.32	25.56	RANKING
2	29	10	-4.66	1.09	25.96	RANKING
2	30	85	-4.66	0.80	25.80	RANKING
2	31	26	-4.66	0.69	25.86	RANKING
2	32	83	-4.66	0.85	25.84	RANKING
2	33	76	-4.66	0.92	25.79	RANKING
2	34	24	-4.66	0.49	25.63	RANKING
2	35	99	-4.65	0.87	25.86	RANKING
2	36	49	-4.65	0.83	25.81	RANKING
2	37	56	-4.65	1.06	25.99	RANKING
2	38	79	-4.65	0.88	25.80	RANKING
2	39	3	-4.65	0.88	25.91	RANKING
2	40	20	-4.65	0.37	25.54	RANKING
2	41	60	-4.64	0.54	25.68	RANKING

2	42	45	-4.63	0.29	25.45	RANKING
3	1	93	-4.71	0.00	26.87	RANKING
3	2	21	-4.71	0.09	26.94	RANKING
3	3	59	-4.70	0.10	26.88	RANKING
3	4	46	-4.69	0.05	26.87	RANKING
3	5	44	-4.69	0.17	26.95	RANKING
3	6	87	-4.69	0.12	26.90	RANKING
3	7	25	-4.68	0.11	26.90	RANKING
3	8	69	-4.68	0.13	26.84	RANKING
3	9	66	-4.65	0.36	26.97	RANKING
3	10	35	-4.64	0.35	26.97	RANKING
4	1	7	-4.71	0.00	25.06	RANKING
4	2	53	-4.70	0.05	25.05	RANKING
4	3	80	-4.70	0.07	25.04	RANKING
4	4	68	-4.70	0.04	25.08	RANKING
4	5	54	-4.69	0.06	25.07	RANKING
4	6	88	-4.69	0.07	25.06	RANKING
4	7	31	-4.67	0.16	25.02	RANKING
4	8	58	-4.63	1.56	25.15	RANKING
4	9	32	-4.63	1.57	25.17	RANKING
4	10	72	-4.62	1.57	25.16	RANKING
4	11	95	-4.62	1.55	25.13	RANKING
4	12	71	-4.62	1.54	25.11	RANKING
4	13	22	-4.61	1.57	25.17	RANKING
4	14	11	-4.61	1.69	25.28	RANKING
4	15	16	-4.61	1.69	25.28	RANKING
4	16	9	-4.61	1.68	25.28	RANKING
4	17	1	-4.60	1.55	25.13	RANKING
4	18	47	-4.58	1.71	25.32	RANKING
4	19	34	-4.58	1.53	25.07	RANKING
4	20	78	-4.48	1.92	25.94	RANKING
5	1	50	-4.66	0.00	25.94	RANKING
5	2	89	-4.65	0.03	25.96	RANKING
5	3	38	-4.65	0.08	25.92	RANKING
5	4	23	-4.65	0.07	25.96	RANKING
5	5	75	-4.64	0.24	25.90	RANKING
5	6	70	-4.64	0.13	25.94	RANKING
5	7	81	-4.62	0.22	25.92	RANKING
5	8	13	-4.62	0.07	25.96	RANKING

5. *Binding affinity Asiaticin-5V3Y*

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	61	-3.89	0.00	31.49	RANKING
1	2	8	-3.02	1.05	32.02	RANKING
1	3	28	-2.81	1.82	32.54	RANKING
1	4	93	-2.65	1.50	30.30	RANKING
1	5	100	-2.54	0.81	31.62	RANKING
1	6	12	-2.54	0.89	31.86	RANKING
1	7	23	-2.24	0.84	31.50	RANKING
1	8	59	-2.04	1.53	30.38	RANKING
1	9	83	-2.03	0.69	31.56	RANKING
1	10	71	-1.88	1.34	30.58	RANKING
1	11	72	-1.85	0.78	31.43	RANKING
1	12	94	-1.72	0.91	31.08	RANKING
1	13	90	-1.67	0.87	31.25	RANKING
1	14	98	-1.30	1.06	31.30	RANKING
1	15	4	-1.23	1.54	30.35	RANKING
1	16	29	-0.93	1.77	32.61	RANKING
1	17	27	-0.89	1.01	30.94	RANKING
1	18	57	-0.49	1.19	31.71	RANKING
1	19	74	+0.18	0.81	31.38	RANKING
1	20	5	+0.28	1.35	31.26	RANKING
1	21	18	+0.51	1.46	30.70	RANKING
1	22	40	+0.52	0.98	31.52	RANKING
1	23	56	+1.01	1.31	30.80	RANKING
1	24	62	+1.33	0.94	31.46	RANKING
1	25	20	+1.43	1.43	31.93	RANKING
1	26	81	+1.58	1.24	30.92	RANKING
1	27	19	+1.66	1.80	32.39	RANKING
1	28	46	+2.02	0.92	31.73	RANKING
1	29	95	+2.12	1.34	32.03	RANKING
1	30	53	+2.89	1.05	31.49	RANKING
1	31	84	+4.97	1.72	32.10	RANKING
1	32	39	+6.51	1.57	32.19	RANKING
1	33	85	+15.88	1.45	31.44	RANKING
2	1	44	-2.85	0.00	32.06	RANKING
2	2	41	-2.26	1.20	31.93	RANKING
2	3	77	-2.12	1.44	31.48	RANKING
2	4	65	-2.08	1.29	31.43	RANKING
2	5	6	-1.33	1.27	32.43	RANKING
2	6	25	-1.04	1.04	32.11	RANKING

2	7	33	-0.62	1.15	31.91	RANKING
2	8	66	-0.53	1.36	31.98	RANKING
2	9	50	+0.50	1.21	32.53	RANKING
2	10	58	+0.95	1.42	31.66	RANKING
2	11	63	+1.34	1.17	31.66	RANKING
2	12	78	+1.44	1.20	32.32	RANKING
2	13	52	+1.52	1.08	32.10	RANKING
2	14	30	+1.55	1.36	32.41	RANKING
2	15	24	+1.73	1.39	32.49	RANKING
2	16	17	+2.42	1.53	31.84	RANKING
2	17	15	+2.53	1.55	32.00	RANKING
2	18	87	+2.57	1.38	33.19	RANKING
2	19	9	+3.08	1.05	32.12	RANKING
2	20	10	+3.16	1.74	31.05	RANKING
2	21	45	+4.61	1.47	32.60	RANKING
2	22	49	+4.98	1.14	32.12	RANKING
2	23	11	+5.01	1.48	33.13	RANKING
2	24	75	+5.78	1.21	32.69	RANKING
2	25	26	+7.94	1.26	32.87	RANKING
2	26	80	+8.15	1.98	33.81	RANKING
2	27	16	+8.50	1.94	30.59	RANKING
2	28	48	+9.43	1.97	33.75	RANKING
2	29	37	+9.46	1.72	30.99	RANKING
2	30	76	+9.86	1.36	31.62	RANKING
2	31	69	+11.53	1.70	33.55	RANKING
2	32	97	+12.05	1.49	32.94	RANKING
2	33	47	+13.18	1.94	31.16	RANKING
2	34	70	+13.18	1.68	32.90	RANKING
2	35	1	+13.45	1.53	32.44	RANKING
2	36	51	+18.12	1.81	33.55	RANKING
2	37	86	+18.86	1.88	33.84	RANKING
2	38	3	+19.44	1.82	33.74	RANKING
2	39	55	+22.94	1.83	31.53	RANKING
3	1	64	-1.61	0.00	29.51	RANKING
4	1	13	+3.77	0.00	33.07	RANKING
4	2	35	+9.97	1.50	33.25	RANKING
5	1	32	+6.47	0.00	32.72	RANKING
5	2	42	+6.60	0.83	32.85	RANKING
5	3	96	+7.11	0.93	33.05	RANKING
5	4	54	+7.77	1.17	33.06	RANKING
5	5	14	+8.75	0.83	32.79	RANKING
5	6	92	+11.20	0.97	32.78	RANKING

5	7	7	+11.24	1.15	33.21	RANKING
5	8	21	+14.16	1.20	33.29	RANKING
5	9	67	+14.91	1.46	33.66	RANKING
5	10	34	+17.79	1.18	33.30	RANKING
5	11	82	+18.33	1.81	32.80	RANKING
5	12	31	+20.05	1.14	33.00	RANKING
6	1	36	+9.16	0.00	34.69	RANKING
6	2	79	+15.88	1.24	33.68	RANKING
6	3	99	+15.90	0.94	34.27	RANKING
6	4	43	+24.89	1.96	34.85	RANKING
7	1	22	+12.48	0.00	33.69	RANKING
7	2	73	+23.42	1.71	33.22	RANKING
7	3	68	+27.77	1.65	34.66	RANKING
7	4	88	+29.05	1.98	34.56	RANKING
8	1	38	+17.00	0.00	33.95	RANKING
8	2	60	+23.81	1.94	33.70	RANKING
8	3	2	+24.76	1.03	34.27	RANKING
9	1	89	+17.74	0.00	30.77	RANKING
10	1	91	+46.26	0.00	38.16	RANKING

6. *Binding affinity Beta Caryophyllene-5V3Y*

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	91	+6.38	0.00	32.22	RANKING
1	2	32	+6.38	0.01	32.21	RANKING
1	3	70	+6.38	0.01	32.22	RANKING
1	4	74	+6.38	0.01	32.22	RANKING
1	5	90	+6.39	0.01	32.22	RANKING
1	6	23	+6.39	0.01	32.21	RANKING
1	7	18	+6.39	0.01	32.21	RANKING
1	8	13	+6.39	0.01	32.22	RANKING
1	9	62	+6.39	0.01	32.21	RANKING
1	10	82	+6.39	0.01	32.22	RANKING
1	11	60	+6.39	0.01	32.22	RANKING
1	12	75	+6.39	0.01	32.22	RANKING
1	13	97	+6.39	0.01	32.22	RANKING
1	14	21	+6.39	0.01	32.22	RANKING
1	15	31	+6.39	0.01	32.21	RANKING
1	16	49	+6.39	0.03	32.20	RANKING
1	17	40	+6.39	0.01	32.22	RANKING
1	18	57	+6.39	0.01	32.22	RANKING
1	19	58	+6.39	0.01	32.22	RANKING

1	20	46	+6.40	0.00	32.22	RANKING
1	21	19	+6.40	0.06	32.18	RANKING
1	22	24	+6.40	0.01	32.21	RANKING
1	23	53	+6.40	0.01	32.21	RANKING
1	24	87	+6.40	0.07	32.18	RANKING
1	25	42	+6.40	0.04	32.19	RANKING
1	26	56	+6.40	0.01	32.22	RANKING
1	27	29	+6.40	0.02	32.20	RANKING
1	28	72	+6.40	0.01	32.22	RANKING
1	29	81	+6.40	0.01	32.22	RANKING
1	30	28	+6.40	0.01	32.22	RANKING
1	31	26	+6.40	0.01	32.22	RANKING
1	32	9	+6.40	0.03	32.20	RANKING
1	33	79	+6.40	0.01	32.21	RANKING
1	34	30	+6.40	0.03	32.20	RANKING
1	35	38	+6.40	0.05	32.19	RANKING
1	36	96	+6.40	0.01	32.22	RANKING
1	37	36	+6.40	0.05	32.19	RANKING
1	38	6	+6.40	0.06	32.19	RANKING
1	39	86	+6.40	0.01	32.22	RANKING
1	40	85	+6.40	0.04	32.19	RANKING
1	41	95	+6.40	0.05	32.19	RANKING
1	42	73	+6.41	0.05	32.19	RANKING
1	43	51	+6.41	0.05	32.19	RANKING
1	44	84	+6.41	0.01	32.22	RANKING
1	45	41	+6.41	0.04	32.19	RANKING
1	46	88	+6.41	0.01	32.21	RANKING
1	47	52	+6.41	0.03	32.20	RANKING
1	48	83	+6.41	0.04	32.19	RANKING
1	49	71	+6.41	0.06	32.19	RANKING
1	50	4	+6.41	0.00	32.22	RANKING
1	51	48	+6.41	0.02	32.21	RANKING
1	52	63	+6.41	0.05	32.19	RANKING
1	53	50	+6.41	0.05	32.19	RANKING
1	54	35	+6.41	0.07	32.18	RANKING
1	55	16	+6.41	0.04	32.19	RANKING
1	56	47	+6.41	0.06	32.18	RANKING
1	57	2	+6.41	0.01	32.22	RANKING
1	58	43	+6.41	0.04	32.19	RANKING
1	59	59	+6.41	0.03	32.20	RANKING
1	60	76	+6.41	0.02	32.22	RANKING
1	61	25	+6.41	0.06	32.19	RANKING

1	62	66	+6.41	0.03	32.20	RANKING
1	63	98	+6.41	0.01	32.21	RANKING
1	64	100	+6.41	0.06	32.19	RANKING
1	65	34	+6.41	0.04	32.19	RANKING
1	66	89	+6.41	0.02	32.21	RANKING
1	67	99	+6.41	0.04	32.20	RANKING
1	68	54	+6.41	0.05	32.19	RANKING
1	69	78	+6.41	0.05	32.19	RANKING
1	70	1	+6.41	0.06	32.19	RANKING
1	71	93	+6.41	0.03	32.20	RANKING
1	72	44	+6.41	0.05	32.19	RANKING
1	73	39	+6.41	0.06	32.18	RANKING
1	74	61	+6.41	0.05	32.19	RANKING
1	75	45	+6.41	0.03	32.20	RANKING
1	76	64	+6.41	0.05	32.19	RANKING
1	77	20	+6.41	0.04	32.19	RANKING
1	78	8	+6.42	0.04	32.19	RANKING
1	79	15	+6.42	0.05	32.19	RANKING
1	80	11	+6.42	0.02	32.22	RANKING
1	81	67	+6.42	0.03	32.20	RANKING
1	82	33	+6.42	0.04	32.20	RANKING
1	83	27	+6.42	0.06	32.19	RANKING
1	84	55	+6.42	0.02	32.21	RANKING
1	85	3	+6.42	0.03	32.20	RANKING
1	86	69	+6.42	0.05	32.20	RANKING
1	87	80	+6.42	0.03	32.20	RANKING
1	88	37	+6.42	0.04	32.20	RANKING
1	89	17	+6.42	0.05	32.19	RANKING
1	90	77	+6.42	0.05	32.19	RANKING
1	91	10	+6.42	0.07	32.18	RANKING
1	92	68	+6.43	0.05	32.19	RANKING
1	93	92	+6.43	0.05	32.20	RANKING
1	94	65	+6.43	0.07	32.18	RANKING
1	95	5	+6.43	0.04	32.20	RANKING
1	96	7	+6.43	0.04	32.20	RANKING
1	97	14	+6.43	0.07	32.18	RANKING
1	98	22	+6.43	0.04	32.21	RANKING
1	99	94	+6.46	0.08	32.18	RANKING
1	100	12	+6.47	0.03	32.21	RANKING

7. Binding affinity Centellin-5V3Y

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	58	-5.66	0.00	30.00	RANKING
1	2	99	-5.47	1.00	29.80	RANKING
1	3	23	-5.32	1.52	30.54	RANKING
1	4	66	-5.30	0.70	29.90	RANKING
1	5	100	-5.29	0.88	29.90	RANKING
1	6	6	-5.21	1.03	29.84	RANKING
1	7	59	-5.21	0.96	30.38	RANKING
1	8	76	-5.05	1.18	30.23	RANKING
1	9	24	-4.90	1.15	29.80	RANKING
1	10	70	-4.89	0.80	30.07	RANKING
1	11	53	-4.81	1.39	30.42	RANKING
1	12	82	-4.76	0.77	29.93	RANKING
1	13	1	-4.75	1.68	30.48	RANKING
1	14	78	-4.70	0.79	30.00	RANKING
1	15	68	-4.69	1.65	30.47	RANKING
1	16	89	-4.68	1.23	30.26	RANKING
1	17	83	-4.67	1.38	30.85	RANKING
1	18	11	-4.62	1.40	30.51	RANKING
1	19	21	-4.61	1.54	29.98	RANKING
1	20	71	-4.57	0.93	30.32	RANKING
1	21	84	-4.57	1.52	30.59	RANKING
1	22	65	-4.52	0.74	30.05	RANKING
1	23	18	-4.50	1.25	30.24	RANKING
1	24	13	-4.45	1.62	30.90	RANKING
1	25	91	-4.45	1.75	30.94	RANKING
1	26	26	-4.45	1.51	31.02	RANKING
1	27	19	-4.32	1.74	30.90	RANKING
1	28	25	-4.31	1.70	30.26	RANKING
1	29	37	-4.17	1.03	30.03	RANKING
1	30	61	-4.16	1.76	30.99	RANKING
1	31	51	-4.16	0.93	30.26	RANKING
1	32	39	-4.00	1.81	30.88	RANKING
1	33	49	-3.97	1.16	30.29	RANKING
1	34	93	-3.95	1.69	30.33	RANKING
1	35	22	-3.70	0.99	29.81	RANKING
1	36	4	-3.62	1.39	30.67	RANKING
1	37	41	-3.61	1.77	30.38	RANKING
1	38	90	-3.59	1.44	30.27	RANKING
1	39	46	-3.56	1.94	30.77	RANKING

1	40	94	-3.55	0.95	30.31	RANKING
1	41	7	-3.46	0.95	30.31	RANKING
1	42	3	-3.45	1.57	30.42	RANKING
1	43	88	-3.44	1.67	30.33	RANKING
1	44	32	-3.40	1.80	30.36	RANKING
1	45	60	-3.38	1.68	30.10	RANKING
1	46	55	-3.29	1.80	30.66	RANKING
1	47	16	-3.18	1.58	30.77	RANKING
1	48	79	-3.13	1.73	30.57	RANKING
1	49	95	-2.84	1.94	31.01	RANKING
1	50	92	-2.67	0.90	30.21	RANKING
1	51	62	-2.62	1.98	29.80	RANKING
1	52	27	-2.20	1.66	30.50	RANKING
1	53	43	-1.97	1.63	30.52	RANKING
1	54	31	-1.72	1.87	30.07	RANKING
1	55	8	-1.70	1.98	30.74	RANKING
1	56	57	+0.25	1.44	29.77	RANKING
1	57	63	+1.63	1.84	30.59	RANKING
2	1	30	-4.55	0.00	29.57	RANKING
2	2	74	-4.44	1.38	29.59	RANKING
2	3	38	-4.39	1.53	30.10	RANKING
2	4	33	-3.84	1.95	30.40	RANKING
2	5	77	-3.72	1.62	30.13	RANKING
2	6	47	-3.63	1.84	30.36	RANKING
2	7	98	-3.44	1.47	30.00	RANKING
2	8	67	-3.15	1.65	30.17	RANKING
2	9	81	-0.73	1.87	28.98	RANKING
2	10	64	+0.96	1.87	28.76	RANKING
3	1	17	-4.48	0.00	29.97	RANKING
3	2	48	-3.11	1.34	30.97	RANKING
3	3	9	-2.31	1.56	30.08	RANKING
3	4	5	-1.49	1.46	30.30	RANKING
3	5	10	+12.12	1.73	30.79	RANKING
4	1	40	-3.78	0.00	29.27	RANKING
4	2	50	-3.37	0.80	29.38	RANKING
4	3	73	-2.98	0.99	29.74	RANKING
4	4	86	-1.30	0.83	29.71	RANKING
5	1	54	-3.45	0.00	27.08	RANKING
5	2	80	-2.00	1.75	28.16	RANKING
5	3	34	-1.00	1.87	27.88	RANKING
6	1	42	-1.23	0.00	30.75	RANKING
7	1	87	-0.36	0.00	30.56	RANKING

7	2	45	+0.24	0.80	30.54	RANKING
8	1	69	+1.12	0.00	32.68	RANKING
8	2	12	+2.24	1.68	32.49	RANKING
8	3	14	+3.45	1.19	32.63	RANKING
8	4	72	+3.74	1.22	32.59	RANKING
8	5	52	+3.79	1.13	32.79	RANKING
8	6	35	+3.80	1.45	32.53	RANKING
8	7	2	+3.86	1.22	32.73	RANKING
8	8	75	+3.95	0.92	32.71	RANKING
8	9	56	+4.24	1.14	32.54	RANKING
8	10	96	+5.05	0.94	32.58	RANKING
8	11	20	+5.77	1.28	32.73	RANKING
8	12	85	+6.38	0.90	32.58	RANKING
8	13	15	+6.76	1.21	32.71	RANKING
8	14	44	+8.53	1.14	33.11	RANKING
9	1	36	+8.59	0.00	32.78	RANKING
10	1	29	+9.55	0.00	32.70	RANKING
10	2	28	+9.58	0.88	32.64	RANKING
11	1	97	+17.20	0.00	32.42	RANKING

#### 8. *Binding affinity* Isoniazid-5V3Y

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	43	-4.08	0.00	36.21	RANKING
1	2	86	-4.08	0.01	36.21	RANKING
1	3	12	-4.08	0.01	36.21	RANKING
1	4	77	-4.08	0.03	36.20	RANKING
1	5	62	-4.08	0.02	36.21	RANKING
1	6	90	-4.08	0.02	36.20	RANKING
1	7	92	-4.08	0.01	36.21	RANKING
1	8	82	-4.07	0.02	36.21	RANKING
1	9	44	-4.07	0.03	36.21	RANKING
1	10	33	-4.07	0.05	36.19	RANKING
1	11	27	-4.07	0.02	36.20	RANKING
1	12	9	-4.07	0.02	36.21	RANKING
1	13	37	-4.07	0.05	36.18	RANKING
1	14	7	-4.07	0.04	36.19	RANKING
1	15	95	-4.07	0.03	36.20	RANKING
1	16	13	-4.07	0.04	36.20	RANKING
1	17	98	-4.07	0.03	36.20	RANKING
1	18	87	-4.07	0.03	36.20	RANKING
1	19	72	-4.06	0.03	36.22	RANKING

1	20	88	-4.06	0.04	36.22	RANKING
1	21	81	-4.06	0.05	36.23	RANKING
1	22	19	-4.06	0.27	36.01	RANKING
1	23	76	-4.06	0.27	36.00	RANKING
1	24	85	-4.06	0.04	36.22	RANKING
1	25	80	-4.06	0.27	36.01	RANKING
1	26	20	-4.06	0.27	36.00	RANKING
1	27	96	-4.06	0.05	36.23	RANKING
1	28	99	-4.06	0.04	36.22	RANKING
1	29	66	-4.06	0.28	35.98	RANKING
1	30	46	-4.06	0.29	35.97	RANKING
1	31	11	-4.06	0.27	36.00	RANKING
1	32	18	-4.06	0.04	36.22	RANKING
1	33	26	-4.06	0.26	36.01	RANKING
1	34	91	-4.05	0.26	36.02	RANKING
1	35	25	-4.05	0.05	36.20	RANKING
1	36	35	-4.04	0.25	36.03	RANKING
1	37	45	-4.04	0.07	36.19	RANKING
1	38	22	-4.04	0.11	36.22	RANKING
1	39	60	-4.04	0.26	36.01	RANKING
1	40	8	-4.04	0.05	36.22	RANKING
1	41	17	-4.04	0.06	36.24	RANKING
1	42	64	-4.03	0.08	36.22	RANKING
1	43	71	-4.03	0.07	36.22	RANKING
1	44	83	-4.03	0.11	36.22	RANKING
1	45	36	-4.03	0.09	36.22	RANKING
1	46	31	-4.03	0.30	35.97	RANKING
1	47	63	-4.03	0.30	35.97	RANKING
1	48	5	-4.03	0.07	36.19	RANKING
1	49	48	-4.03	0.30	35.97	RANKING
1	50	94	-4.03	0.29	35.98	RANKING
1	51	54	-4.03	0.06	36.20	RANKING
1	52	10	-4.03	0.35	35.92	RANKING
1	53	23	-4.03	0.33	35.95	RANKING
1	54	57	-4.03	0.35	35.93	RANKING
1	55	100	-4.03	0.31	35.97	RANKING
1	56	58	-4.03	0.31	35.97	RANKING
1	57	39	-4.03	0.31	35.97	RANKING
1	58	84	-4.03	0.35	35.94	RANKING
1	59	4	-4.03	0.06	36.20	RANKING
1	60	30	-4.03	0.27	35.99	RANKING
1	61	40	-4.03	0.07	36.19	RANKING

1	62	21	-4.02	0.32	35.97	RANKING
1	63	14	-4.02	0.07	36.21	RANKING
1	64	50	-4.02	0.07	36.19	RANKING
1	65	42	-4.02	0.31	35.97	RANKING
1	66	28	-4.02	0.09	36.19	RANKING
1	67	73	-4.02	0.33	35.96	RANKING
1	68	53	-4.02	0.32	35.97	RANKING
1	69	74	-4.02	0.31	35.97	RANKING
1	70	93	-4.02	0.31	35.97	RANKING
1	71	55	-4.02	0.32	35.97	RANKING
1	72	16	-4.02	0.08	36.20	RANKING
1	73	38	-4.02	0.31	35.97	RANKING
1	74	41	-4.02	0.08	36.19	RANKING
1	75	51	-4.02	0.25	36.01	RANKING
1	76	24	-4.02	0.33	35.96	RANKING
1	77	6	-4.02	0.32	35.96	RANKING
1	78	59	-4.01	0.34	35.96	RANKING
1	79	75	-4.01	0.11	36.23	RANKING
1	80	15	-4.01	0.33	35.96	RANKING
1	81	65	-4.01	0.32	35.97	RANKING
1	82	52	-4.01	0.35	35.95	RANKING
1	83	79	-4.01	0.35	35.97	RANKING
1	84	32	-3.99	0.10	36.18	RANKING
2	1	29	-4.05	0.00	30.90	RANKING
2	2	69	-4.05	0.30	30.94	RANKING
2	3	67	-4.05	0.05	30.92	RANKING
2	4	70	-4.04	0.29	30.95	RANKING
2	5	2	-4.04	0.07	30.93	RANKING
2	6	56	-4.04	0.39	30.81	RANKING
2	7	89	-4.04	0.36	30.78	RANKING
2	8	78	-4.03	0.07	30.91	RANKING
2	9	61	-4.03	0.30	30.95	RANKING
2	10	1	-4.03	0.07	30.93	RANKING
2	11	3	-4.03	0.31	30.95	RANKING
2	12	68	-4.01	0.27	31.10	RANKING
2	13	47	-4.01	0.29	30.94	RANKING
2	14	34	-4.01	0.33	31.00	RANKING
3	1	97	-3.60	0.00	34.56	RANKING
3	2	49	-3.59	0.06	34.58	RANKING

## Lampiran 6. Hasil Uji Statistik Normalitas

### 1. Kode Protein 4KM2

#### Tests of Normality

Kode		Kolmogorov-Smirnov <sup>a</sup>			Shapiro-Wilk		
		Statistic	df	Sig.	Statistic	df	Sig.
Binding_Afinity-4KM2	Binding Afinity Isoniazid	.187	5	.200*	.964	5	.834
	Binding Afinity Asiaticin	.326	5	.087	.792	5	.069
	Binding Afinity Beta Caryo	.367	5	.026	.684	5	.006
	Binding Afinity Centellin	.284	5	.200*	.802	5	.084

\*. This is a lower bound of the true significance.

a. Lilliefors Significance Correction

### 2. Kode Protein 5V3Y

#### Tests of Normality

Kode		Kolmogorov-Smirnov <sup>a</sup>			Shapiro-Wilk		
		Statistic	df	Sig.	Statistic	df	Sig.
Binding_Afinity-5V3Y	Binding Afinity Isoniazid	.315	5	.116	.790	5	.068
	Binding Afinity Asiaticin	.236	5	.200*	.939	5	.657
	Binding Afinity Beta Caryo	.243	5	.200*	.922	5	.544
	Binding Afinity Centellin	.159	5	.200*	.970	5	.876

\*. This is a lower bound of the true significance.

a. Lilliefors Significance Correction

## Lampiran 7. Hasil Uji Statistik Homogenitas

### 1. Kode Protein 4KM2

#### Test of Homogeneity of Variance

		Levene Statistic	df1	df2	Sig.
Binding_Afinity-4KM2	Based on Mean	9.400	3	16	.001
	Based on Median	1.824	3	16	.183
	Based on Median and with adjusted df	1.824	3	7.778	.223
	Based on trimmed mean	8.713	3	16	.001

## 2. Kode Protein 5V3Y

### Test of Homogeneity of Variance

		Levene Statistic	df1	df2	Sig.
Binding_Afinity-5V3Y	Based on Mean	3.144	3	16	.054
	Based on Median	1.931	3	16	.165
	Based on Median and with adjusted df	1.931	3	7.022	.213
	Based on trimmed mean	3.023	3	16	.060

### Lampiran 8. Hasil Uji Statistik ANOVA Pada Kode Protein 5V3Y

**ANOVA**

Binding_Afinity	Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
Between Groups	421.173	3	140.391	1060.455	.000
Within Groups	2.118	16	.132		
Total	423.291	19			

### Lampiran 9. Hasil Uji *Post Hoc* Pada Kode Protein 5V3Y

**Multiple Comparisons**

Dependent Variable: Binding\_Afinity  
LSD

(I) Kode	(J) Kode	Mean Difference (I- J)	Std. Error	Sig.	95% Confidence Interval	
					Lower Bound	Upper Bound
Binding Afinity Isoniazid	Binding Afinity Asiaticin	-.93200*	.23012	.001	-1.4198	-.4442
	Binding Afinity Beta Caryo	-10.26600*	.23012	.000	-10.7538	-9.7782
	Binding Afinity Centellin	1.40200*	.23012	.000	.9142	1.8898
Binding Afinity Asiaticin	Binding Afinity Isoniazid	.93200*	.23012	.001	.4442	1.4198
	Binding Afinity Beta Caryo	-9.33400*	.23012	.000	-9.8218	-8.8462
	Binding Afinity Centellin	2.33400*	.23012	.000	1.8462	2.8218
Binding Afinity Beta Caryo	Binding Afinity Isoniazid	10.26600*	.23012	.000	9.7782	10.7538
	Binding Afinity Asiaticin	9.33400*	.23012	.000	8.8462	9.8218
	Binding Afinity Centellin	11.66800*	.23012	.000	11.1802	12.1558
Binding Afinity Centellin	Binding Afinity Isoniazid	-1.40200*	.23012	.000	-1.8898	-.9142
	Binding Afinity Asiaticin	-2.33400*	.23012	.000	-2.8218	-1.8462
	Binding Afinity Beta Caryo	-11.66800*	.23012	.000	-12.1558	-11.1802

\*. The mean difference is significant at the 0.05 level.

**Lampiran 10.** Hasil Uji Kruskal-Wallis Pada Kode Protein 4KM2

**Test Statistics<sup>a,b</sup>**

	Binding_Afinit y
Kruskal-Wallis H	13.382
df	3
Asymp. Sig.	.004

a. Kruskal Wallis Test

b. Grouping Variable: Kode

