STUDI IN SILICO POTENSI TANAMAN CENGKEH (*Syzygium aromaticum*) PADA PENGOBATAN DIABETES MELITUS TIPE 2

SKRIPSI

Disusun Untuk Memenuhi Sebagian Persyaratan

Mencapai Derajat Sarjana Farmasi

Diajukan Oleh:

Ashkadia Luh Zahra

NIM : 2021050007

PROGRAM STUDI FARMASI PROGRAM SARJANA

FAKULTAS ILMU KESEHATAN

UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH GOMBONG

2025

STUDI IN SILICO POTENSI TANAMAN CENGKEH (*Syzygium aromaticum*) PADA PENGOBATAN DIABETES MELITUS TIPE 2

SKRIPSI

Disusun Untuk Memenuhi Sebagian Persyaratan

Mencapai Derajat Sarjana Farmasi

Diajukan Oleh:

Ashkadia Luh Zahra

NIM : 2021050007

PROGRAM STUDI FARMASI PROGRAM SARJANA

FAKULTAS ILMU KESEHATAN

UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH GOMBONG

2025

HALAMAN PERSETUJUAN

STUDI IN SILICO POTENSI TANAMAN CENGKEH (*Syzygium aromaticum*)
PADA PENGOBATAN DIABETES MELITUS TIPE 2

Telah disetujui dan dinyatakan Telah Memenuhi Syarat untuk diujikan pada
Tanggal 14 Mei 2025

Yang dipersiapkan dan disusun oleh:
Ashkadia Luh Zahra
NIM.2021050007

Susunan Tim Pembimbing

1. Dr. apt. Muhammad Husnul Khuluq, M.Farm (Pembimbing 1) .....
2. Sugeng Supriyanto, M.S.Farm (Pembimbing 2) .....

Mengetahui
Ketua Program Studi Farmasi Program Sarjana
Fakultas Ilmu Kesehatan
Universitas Muhammadiyah Gombong

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

NIDN : 0618109202

HALAMAN PENGESAHAN

STUDI IN SILICO POTENSI TANAMAN CENGKEH (*Syzygium aromaticum*)
PADA PENGOBATAN DIABETES MELITUS TIPE 2

Yang dipersiapkan dan disusun oleh:
Ashkadia Luh Zahra
NIM : 2021050007
Telah dipertahankan di depan Tim Penguji pada tanggal 14 Mei 2025

Susunan Tim Pembimbing

1. Dr. apt. Naelaz Zukhruf W K, M.Pharm.,Sci (Ketua Penguji) (.....)
2. Dr. apt. Muhammad Husnul Khuluq, M.Farm (Pembimbing 1) (.....)
3. Sugeng Supriyanto, M.S.Farm (Pembimbing 2) (.....)

Mengetahui,
Ketua Program Studi Farmasi Program Sarjana
Fakultas Ilmu Kesehatan
Universitas Muhammadiyah Gombong

(Dr. apt. Naelaz Zukhruf Wakhidatul Kiromah, M.Pharm.,Sci)
NIDN : 0618109202

HALAMAN PERNYATAAN KEASLIAN PENELITIAN

Saya yang bertanda tangan dibawah ini :

Nama	: Ashkadia Luh Zahra
NIM	: 2021050007
Program Studi	: S1 Farmasi
Judul Penelitian	: *Studi In Silico* Potensi Tanaman Cengkeh (*Syzygium aromaticum*) Pada Pengobatan Diabetes Melitus Tipe 2

Menyatakan dengan sebenarnya bahwa penelitian ini adalah hasil karya sendiri. Sepanjang sepengetahuan saya, skripsi ini tidak berisi materi yang pernah dipublikasikan atau ditulis orang lain atau 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, 26 April 2025

Yang membuat pernyataan



Ashkadia Luh Zahra

HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI

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

Nama	: Ashkadia Luh Zahra
NIM	: 2021050007
Program Studi	: S1 Farmasi
Jenis Karya	: Skripsi

Demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Universitas Muhammadiyah Gombong **Hak Bebas Royalti Noneksklusif (Nonexclusive Royalty-Free Right)** atas skripsi saya yang berjudul :

***Studi In Silico* Potensi Tanaman Cengkeh (*Syzygium aromaticum*) Pada Pengobatan Diabetes Melitus Tipe 2**

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

Gombong, 26 April 2025

Yang membuat pernyataan



Ashkadia Luh Zahra

KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan kehadirat Allah SWT karena rahmat, hidayah dan karunia-Nya penulis dapat menyelesaikan skripsi ini dengan judul "*Studi In Silico* Potensi Tanaman Cengkeh (*Syzygium aromaticum*) Pada Pengobatan Diabetes Melitus Tipe 2". Proposal ini diajukan sebagai salah satu syarat untuk mencapai gelar Sarjana Farmasi di Universitas Muhammadiyah Gombong. Penulis menyadari bahwa dalam penulisan skripsi ini tidak lepas dari kesalahan sehingga penulis mengharapkan kritik dan saran yang membangun sehingga dapat berguna baik bagi penulis sendiri maupun bagi pembaca.

Dalam menyelesaikan skripsi ini, penulis telah mendapatkan bantuan serta dukungan baik secara moral maupun material. Sehingga dalam kesempatan kali ini penulis mengucapkan terimakasih kepada:

1. Ibu Dr. Hj. Herniyatun, M.Kep.,Sp.Mat selaku Rektor Universitas Muhammadiyah Gombong.
2. Dr. apt. Naelaz Zukruf W K., M.Pharm.Sci selaku Ketua Program Studi Farmasi Program Sarjana Fakultas Ilmu Kesehatan Universitas Muhammadiyah Gombong.
3. Dr. apt. Muhammad Husnul Khuluq, M.Farm selaku Dosen Pembimbing I yang telah meluangkan waktu, memberikan masukan ilmu dan semangat dalam penyusunan skripsi ini.
4. Sugeng Supriyanto, M.S.Farm selaku Dosen Pembimbing II yang telah meluangkan waktu, memberikan masukan ilmu dan semangat dalam penyusunan skripsi ini.
5. Seluruh civitas akademika Program Studi Farmasi Program Sarjana Fakultas Ilmu Kesehatan Universitas Muhammadiyah Gombong.
6. Ibu dan Bapak yang telah memberikan segala dukungan, doa dan motivasi untuk senantiasa semangat hingga terselesaikan skripsi ini.
7. Teman-teman yang senantiasa meluangkan waktu dan pikiran untuk membantu dalam penyelesaian proposal penelitian ini.

8. Semua pihak yang tidak bisa disebutkan satu persatu yang telah membantu penyusunan skripsi ini.

Penulis menyadari adanya kekurangan dalam penyusunan skripsi ini. Besar harapan penulis akan saran dan kritik yang membangun demi kesempurnaan dan perbaikan sehingga dapat dijadikan acuan tindak lanjut penelitiaan dan bermanfaat bagi semua khususnya bidang kefarmasian. Aamiin.

Gombong, 27 April 2025

Penulis

Ashkadia Luh Zahra

NIM. 2021050007

PROGRAM STUDI FARMASI PROGRAM SARJANA

FAKULTAS ILMU KESEHATAN

UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH GOMBONG

Skripsi, April 2025

Ashkadia Luh Zahra[(1)], Muhammad Husnul Khuluq[(2)], Sugeng Supriyanto[(3)]

ABSTRAK

STUDI IN SILICO POTENSI TANAMAN CENGKEH *(Syzygium aromaticum*) PADA PENGOBATAN DIABETES MELITUS TIPE 2

Latar Belakang: Diabetes melitus tipe 2 (DM tipe 2) merupakan penyakit metabolik yang prevalensinya meningkat secara global dan menjadi salah satu penyebab utama kematian dunia. Pengobatan DM tipe 2 umumnya menggunakan terapi oral sintetis, namun penggunaan jangka panjang sering menimbulkan efek samping. Tanaman cengkeh (*Syzygium aromaticum*) dikenal mengandung senyawa metabolit sekunder yang berpotensi sebagai agen anti-diabetes alami.

Tujuan penelitian: enelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi senyawa aktif dari tanaman cengkeh sebagai agen terapi DM tipe 2 melalui mekanisme interaksi dengan protein target yaitu Dipeptidyl Peptidase-4 (DPP-4) dan Protein PPARγ.

Metode penelitian: Penelitian dilakukan secara *in silico* dengan metode *molecular docking* menggunakan perangkat lunak AutoDockTools. Senyawa uji dipilih berdasarkan kriteria *druglikeness*, farmakokinetika, dan toksisitas. Senyawa pembanding yang digunakan adalah sitagliptin dan ligan alami. Analisis statistik dilakukan menggunakan uji ANOVA.

Hasil Penelitian: Hasil skrinning senyawa tanaman cengkeh didapatkan enam senyawa yang memenuhi persyaratan yaitu 2-Heptanone, 5-Hydroxytryptamine, Kaempferol, Rhamnocitrin, Rhamnetin, 5-Methoxytryptamine. Hasil docking didapatkan senyawa yang terikat pada protein 5T4B dengan binding afinitas terendah yaitu Rhamnetin -7.93 kkal/mol, Sedangkan senyawa yang terikat pada protein 5Y2O dengan binding afinitas terendah yaitu Rhamnocitrin -7,19 kkal/mol, beta-Caryophyllene 6.38 kkal/mol, dan centellin -5.66 kkal/mol.

Kesimpulan: Berdasarkan hasil, senyawa metabolit sekunder tanaman cengkeh yang memiliki potensi paling baik sebagai anti-Diabetes Melitus tipe 2 yaitu Rhamnetin dengan interaksi terkuat yang terjadi membentuk ikatan hidrogen.

Rekomendasi: Diperlukan uji eksperimental secara *in vitro* dan *in vivo* untuk memastikan potensi terapeutik senyawa tersebut.

Kata kunci : anti-DM tipe 2, *in silico, molecular docking*, tanaman cengkeh

[1]Mahasiswa Universitas Muhammadiyah Gombong
[2]Dosen Universitas Muhammadiyah Gombong
[3]Dosen Universitas Muhammadiyah Gombong

BACHELOR PHARMACY STUDY PROGRAM

FACULTY OF HEALTH SCIENCES

UNIVERSITY OF MUHAMMADIYAH GOMBONG

Thesis, April 2025

Ashkadia Luh Zahra[(1)], Muhammad Husnul Khuluq[(2)], Sugeng Supriyanto[(3)]

ABSTRACT

IN SILICO STUDY OF THE POTENTIAL OF CLOVE PLANTS (Syzygium aromaticum) IN THE TREATMENT OF TYPE 2 DIABETES MELLITUS

Background: *Type 2 diabetes mellitus (DM type 2) is a metabolic disease whose prevalence is increasing globally and is one of the leading causes of death worldwide. Treatment of type 2 diabetes generally uses synthetic oral therapy, but long-term use often causes side effects. The clove plant (Syzygium aromaticum) is known to contain secondary metabolite compounds that have the potential to be natural anti-diabetic agents.*

Purpose: *This study aims to determine the potential of active compounds from clove plants as therapeutic agents of type 2 DM through the mechanism of interaction with target proteins, namely Dipeptidyl Peptidase-4 (DPP-4) and PPARγ Protein.*

Method: *The research was conducted in silico using the molecular docking method using AutoDockTools software. The test compounds were selected based on the criteria of druglikeness, pharmacokinetics, and toxicity. The comparative compounds used are sitagliptin and natural ligands. Statistical analysis was carried out using the ANOVA test.*

Results: *The results of the screening of clove plant compounds were obtained six compounds that met the requirements, namely 2-Heptanone, 5-Hydroxytryptamine, Kaempferol, Rhamnocitrin, Rhamnetin, 5-Methoxytryptamine. The docking results were obtained compounds bound to 5T4B protein with the lowest affinity binding, namely Rhamnetin -7.93 kcal/mol, while compounds bound to 5Y2O protein with the lowest affinity binding were Rhamnocitrin -7.19 kcal/mol, beta-Caryophyllene 6.38 kcal/mol, and centellin -5.66 kcal/mol.*

Conclusion: *Based on the results, the secondary metabolite compound of the clove plant that has the best potential as an anti-Diabetes Mellitus type 2 is Rhamnetin with the strongest interaction that occurs to form a hydrogen bond.*

Recommendation: *Experimental tests in vitro and in vivo are required to confirm the therapeutic potential of the compound.*

Keyword: *anti-DM tipe 2, in silico, molecular docking, clove plants*

[1]*Student of the University of Muhammadiyah Gombong*
[2]*Lecturer of the University of Muhammadiyah Gombong*
[3]*Lecturer of the University of Muhammadiyah Gombong*

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL i
HALAMAN PERSETUJUAN ii
HALAMAN PENGESAHAN iii
HALAMAN PERNYATAAN KEASLIAN PENELITIAN iv
HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI v
KATA PENGANTAR vi
ABSTRAK viii
ABSTRACT ix
DAFTAR ISI x
DAFTAR GAMBAR xiii
DAFTAR TABEL xiv
DAFTAR LAMPIRAN xv
BAB I PENDAHULUAN 1
1.1. Latar Belakang 1
1.2. Rumusan Masalah 4
1.3. Tujuan Penelitian 4
1.3.1. Tujuan Umum 4
1.3.2. Tujuan Khusus 4
1.4. Manfaat Penelitian 5
1.4.1. Bagi Pengembangan Ilmu (Bidang Kefarmasian) 5
1.4.2. Bagi Praktisi (Tempat Penelitian) 5
1.4.3. Bagi Masyarakat 5
1.5. Keaslian Penelitian 5
Tabel 1. 1 Keaslian Penelitian 5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA 8
2.1. Tinjauan Teori 8
2.1.1. Diabetes Melitus Tipe 2 8
2.1.2. Cengkeh 12
2.1.3. Senyawa yang terdapat pada Cengkeh 13

2.1.4. Molekular *Docking* 13
2.1.5. Protein 14
2.1.6. Interaksi Kimia 15
2.1.7. Sumber Informasi 17
2.1.8. Perangkat Lunak 21
2.2. Kerangka Teori 23
2.3. Kerangka Konsep 24
2.4. Hipotesis 24
BAB III METODOLOGI PENELITIAN 25
3.1. Desain atau Rancangan Penelitian 25
3.2. Tempat Dan Waktu Penelitian 25
3.3. Variabel Penelitian 25
3.3.1. Variabel Bebas 25
3.3.2. Variabel Terikat 25
3.3.3. Variabel Terkendali 25
3.4. Definisi Operasional 26
3.5. Instrumen Penelitian 26
3.5.1. Alat 26
3.5.2. Bahan 26
3.6. Teknik Pengumpulan Data 28
3.6.1. Metabolit sekunder cengkeh (*Syzygium aromaticum)* 28
3.6.1.2. Prediksi Farmakokinetik, Toksisitas dan *Lipinski Rule of Five* 28
3.6.2. Preparasi Reseptor Protein 28
3.6.3. Preparasi Ligan Alami 29
3.6.4. Preparasi Ligan Pembanding dan Ligan Uji 29
3.6.5. *Redocking* (Validasi) 29
3.6.6. *Docking* dengan Metabolit Sekunder terpilih cengkeh (*Syzygium aromaticum)* 30
3.6.7. Studi Interaksi dan Visualisasi Hasil *Docking* 30
3.7. Teknik Analisis Data 30
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN 32
4.1. Hasil Penelitian 32

4.1.1. Protein target 32
4.1.2. Metabolit Sekunder Tanaman Cengkeh 32
4.1.3. Skrinning Senyawa Metabolit Sekunder Tanaman Cengkeh 33
4.1.3.1. Lipinski 33
4.1.3.2. Skrinning Farmakokinetik dan Toksisitas Senyawa Metabolit Sekunder 35
4.1.3.3. Senyawa Uji Terpilih 37
4.1.4. Validasi *Docking* 37
4.1.4.1. Preparasi Protein dan Ligan 37
4.1.4.2. Redocking 38
4.1.4.2.1. Hasil Validasi 38
4.1.4.2.2. Protokol dan Hasil Validasi *Docking* 38
4.1.5. *Docking* 39
4.1.5.1. Senyawa Kandidat yang Telah Dioptimasi 39
4.1.5.2. Ligan Pembanding yang Telah Dioptimasi 40
4.1.5.3. Hasil *Docking* 41
4.1.6. Analisis Hasil *Docking* 45
4.1.7. Uji Statistik SPSS 54
4.1.7.1. Uji Normalitas 54
4.1.7.2. Hasil Uji Homogenitas 54
4.1.7.3. Hasil Uji One Way Anova 54
4.2. Pembahasan 55
4.3. Keterbatasan Penelitian 66
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN 67
5.1. Kesimpulan 67
5.2. Saran 67
DAFTAR PUSTAKA
LAMPIRAN

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Kerangka Teori 23
Gambar 2. 2 Kerangka Konsep..... 24
Gambar 4. 1 Preparasi Protein dan Ligan 5T4B. A. Protein sebelum dipreparasi B. Protein setelah dipreparasi C. Ligan alami setelah dipreparasi..... 37
Gambar 4. 2 Preparasi Protein dan Ligan 5Y2O. A. Protein sebelum dipreparasi B. Protein setelah dipreparasi C. Ligan alami setelah dipreparasi..... 37
Gambar 4. 3 Hasil Validasi 5T4B, Ligan Berwarna Kuning 38
Gambar 4. 4 Hasil Validasi 5Y2O, Ligan Berwarna Kuning 38
Gambar 4. 5 Ligan Pembanding 5T4B yang Telah Dioptimasi (Sitagliptin) 40
Gambar 4. 6 Ligan Pembanding 5Y2O yang Telah Dioptimasi (Ligan Alami) . 40

DAFTAR TABEL

Tabel 1. 1 Keaslian Penelitian 5
Tabel 2. 1 Indikator Farmakokinetik (ADMET) 20
Tabel 3. 1 Definisi Operasional 26
Tabel 4. 1 Protein Target 32
Tabel 4. 2 Senyawa Aktif Tanaman Cengkeh 32
Tabel 4. 3 Hasil Skrinning Lipinski 33
Tabel 4. 4 Hasil Skrinning ADMET 35
Tabel 4. 5 Senyawa Uji Terpilih 37
Tabel 4. 6 Protokol dan Hasil Validasi Docking 5T4B 38
Tabel 4. 7 Protokol dan Hasil Validasi Docking 5Y2O 38
Tabel 4. 8 Tabel Nilai RMSD 39
Tabel 4. 9 Tabel Senyawa Kandidat yang Telah Dioptimasi 39
Tabel 4. 10 Tabel Hasil Docking 5t4b dengan Senyawa Kandidat Obat dan Ligan Pembanding 41
Tabel 4. 11 Tabel Hasil Docking 5Y2O dengan Senyawa Kandidat Obat dan Ligan Pembanding 43
Tabel 4. 12 Analisis Hasil Docking 5t4b 45
Tabel 4. 13 Analisis Hasil Docking 5Y2O 47
Tabel 4. 14 Hasil Perhetingan Keasaman Residu 49
Tabel 4. 15 Hasil Uji Normalitas 54
Tabel 4. 16 Hasil Uji Homogenitas 54
Tabel 4. 17 Hasil Uji One Way Anova 54

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Hasil Binding affinity Analisis Docking 79
Lampiran 2. Hasil Uji Normalitas 107
Lampiran 3. Hasil Uji Homogenitas 108
Lampiran 4. Hasil Uji ANOVA 109
Lampiran 5. Bebas Etik 110
Lampiran 6. Uji Turnitin 111
Lampiran 7. Lembar Bimbingan 112

BAB I
PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Diabetes melitus merupakan salah satu penyakit degeneratif yang disebabkan karena faktor genetik, diet tinggi kalori, pola hidup *sendetary*, dan penyakit lainnya yang ditandai dengan kondisi hiperglikemia akibat penurunan atau gangguan fungsi *signaling* insulin di sel target (Sugiharto et al., 2021). Diabetes melitus (DM) Tipe 2 merupakan penyakit kronik progresif yang dikarakteristik dengan pankreas kehilangan kemampuannya dalam merespon secara efektif untuk merangsang produksi insulin, dikenal sebagai resistensi insulin (Simatupang & Kristina, 2023).

International Diabetes Federation (IDF) telah menghimpun data pada tahun 2019, sekitar 463 juta orang, atau sekitar 9,3% dari populasi dunia, telah didiagnosis menderita diabetes melitus, dan perkiraan menunjukkan bahwa angka tersebut akan terus meningkat menjadi sekitar 783 juta orang, atau sekitar 12,2% dari populasi dunia, pada tahun 2045. Tahun 2018 RISKESDAS membuat laporan bahwa jumlah orang Indonesia yang menderita diabetes melitus mencapai sekitar 20,4 juta orang, setara dengan sekitar 10,9% dari total populasi Indonesia yang kini mencapai 240 juta orang. Indonesia menduduki peringkat keenam dalam daftar negara-negara dengan jumlah penderita diabetes tertinggi di dunia (kemenkes RI, 2020). Berdasarkan data tersebut maka diperlukan suatu upaya dalam menangani kasus diabetes melitus mulai dengan pendekatan pengobatan konvensional hingga herbal yang dipercaya dapat membantu mengobati penyakit diabetes melitus.

Pedoman pengobatan menyarankan penggunaan metformin sebagai pengobatan lini pertama. Ini dapat dilakukan bersamaan dengan obat antidiabetes oral 1 atau 2. Penghambat dipeptidil peptidase-4 (DPP-4) telah ditambahkan ke algoritma pengobatan DM. Sitagliptin, saxagliptin, vildagliptin dan linagliptin adalah golongan Obat anti diabetes (OAD) yang

bekerja menghambat enzim DPP-4. Penghambat DPP-4 memiliki efek yang mirip dengan obat OAD lainnya, tetapi juga dapat meningkatkan hemoglobin terglikasi (A1C) secara moderat. Meskipun DPP-4 tidak digunakan sebagai pengobatan awal untuk pasien diabetes tipe 2, namun dapat digunakan sebagai pengobatan untuk pasien yang tidak dapat ditoleransi, memiliki gejala yang menyertai, atau tidak terkendali saat mengonsumsi metformin (Deacon, 2020).

Pada penelitian yang dilakukan (Adiputra, 2023) mengenai efek pengambilan sampel yang disebabkan oleh obat diabetes, hasil penelitian menunjukkan bahwa penggunaan obat anti diabetes jangka panjang dapat menghasilkan efek samping. Efek samping yang paling umum adalah gangguan pencernaan, seperti mual dan muntah, yang disebabkan oleh peningkatan resiko hiperglikemia, terutama dari penggunaan obat yang mengandung sulfonilurea. Namun, efek samping yang serius seperti kerusakan hati atau masalah kardiovaskular muncul dalam proposisi yang lebih rinci.

Indonesia menduduki peringkat kedua setelah Brazil dalam hal kekayaan *biodiversitas* (Alexander, 2020). Tahun 2017, Indonesia telah mengidentifikasi sekitar 31.750 variasi tanaman. Angka ini mewakili sekitar 1,75% dari total tanaman yang telah diidentifikasi di seluruh dunia, yang mencapai 1.812.700 jenis. Sekitar 15.000 tanaman di Indonesia memiliki potensi sebagai obat-obatan, tetapi hanya sekitar 7.000 jenis yang sebenarnya dimanfaatkan sebagai bahan baku dalam pembuatan obat (Retnowati *et al*., 2019). Salah satu tanaman yang telah dipercaya memiliki khasiat sebagai antidiabetes adalah tanaman cengkeh (*Syzygium aromaticum)*.

Cengkeh (*Syzygium aromaticum*) merupakan batang berbunga tidak berair aromatik dari pohon *family Myrtaceae* (Surbakti et al., 2022). Menurut hasil analisis Kromatografi lapisan tipis yang dilakukan oleh Trisharyanti, I (2016), cengkeh dikatakan memiliki potensi antidiabetes. Konstituennya meliputi alkaloid, fenol, flavonoid, triterpenoid, terpenoid,

dan saponin. Menurut penelitian sebelumnya oleh Wahyulianingsih (2016), total kandungan flavonoid yang ditemukan pada cengkeh sekitar 73,08 mgRE/g ekstrak dengan kadar 7,308%. Flavonoid telah terbukti menjadi antidiabetes yang efektif.

Metode *in silico* merupakan salah satu strategi yang dimanfaatkan dalam penemuan senyawa yang memiliki potensi sebagai calon obat. Penerapan metode *in silico* ini memberikan beberapa kelebihan, seperti mengurangi kebutuhan akan peralatan dan bahan serta meningkatkan efisiensi dalam hal biaya penelitian (Frimayanti et al., 2018). Salah satu teknik yang sering digunakan dalam simulasi komputasi adalah *molecular docking*. *Molecular docking* merupakan metode perhitungan yang berguna untuk memprediksi interaksi antara dua jenis molekul, misalnya antara protein dan ligan (Arciniega, 2018).

Dipeptidil peptidase-4 (DPP-4) adalah enzim yang berfungsi memecah hormon inkretin, seperti *glucagon-like peptide-1* (GLP-1) dan *glucose-dependent insulinotropic peptide* (GIP), yang berperan penting dalam mengatur kadar glukosa darah. Enzim DPP-4 memotong dua asam amino dari ujung N-terminal hormon-hormon ini, sehingga menginaktivasi fungsinya. Hambatan terhadap aktivitas DPP-4 menyebabkan peningkatan kadar GLP-1 dan GIP, yang berkontribusi pada peningkatan sekresi insulin dari sel beta pankreas serta penurunan sekresi glukagon dari sel alfa pankreas. Mekanisme ini membantu menurunkan kadar glukosa darah, terutama setelah makan. Inhibitor DPP-4, seperti alogliptin, digunakan dalam terapi diabetes mellitus tipe 2 untuk memperpanjang efek hormon inkretin dan memperbaiki kontrol glikemik. (Capuano et al., 2013).

Berdasarkan uraian diatas, cengkeh berpotensi untuk dikembangkan menjadi salah satu alternatif terapi bagi penderita Diabetes Melitus. Penelitian mengenai potensi senyawa aktif yang ada pada cengkeh berkaitan dengan diabetes melitus tipe 2 secara *in silico* masih belum ditemukan. Oleh karena itu, penting dilakukan penelitian untuk

mengeksplorasi potensi senyawa metabolit sekunder tersebut sebagai solusi dalam mengatasi penyakit diabetes mellitus tipe 2.

1.2. Rumusan Masalah

1.2.1. Bagaimana prediksi dan hasil dari farmakokinetik ADMET, toksisitas, *dan Lipinski Rule of Five* dari senyawa metabolit sekunder terpilih Cengkeh (*Syzygium aromaticum*)?

1.2.2. Bagaimana potensi kandungan dari senyawa metabolit sekunder terpilih Cengkeh (*Syzygium aromaticum*) untuk terapi DM tipe 2 berdasarkan nilai *binding affinity* dengan metode *in silico*?

1.2.3. Apa interaksi yang terjadi antara senyawa metabolit sekunder terpilih Cengkeh (*Syzygium aromaticum*) dengan protein *dipeptidyl peptidase-4* dan PPARγ secara *in silico* ?

1.3. Tujuan Penelitian

1.3.1. Tujuan Umum

Penelitian ini bertujuan untuk mengeksplorasi kemungkinan senyawa yang terdapat dalam Cengkeh (*Syzygium aromaticum*) dalam merangsang aktivitas protein *Dipeptidyl peptidase-4* dan PPARγ sebagai potensi terapi untuk mengatasi DM tipe 2.

1.3.2. Tujuan Khusus

1.3.2.1. Menyeleksi senyawa metabolit sekunder yang terdapat pada Cengkeh (*Syzygium aromaticum*) dengan cara farmakokinetik ADMET, toksisitas, dan *Lipinski Rule of Five.*

1.3.2.2. Mengetahui senyawa metabolit sekunder terpilih yang dimiliki oleh Cengkeh (*Syzygium aromaticum*) yang berpotensi sebagai agen antidiabetes berdasarkan nilai *binding affinity.*

1.3.2.3. Mengeksplorasi kemungkinan interaksi senyawa metabolit sekunder dengan protein *Dipeptidyl peptidase-4* dan PPARγ menggunakan studi *in silico.*

1.4. Manfaat Penelitian

1.4.1. Bagi Pengembangan Ilmu (Bidang Kefarmasian)

1.4.1.1. Menambah referensi calon obat baru pada pengobatan diabetes melitus berupa suatu senyawa metabolit sekunder yang ada ada Cengkeh (*Syzygium aromaticum*).

1.4.2. Bagi Praktisi (Tempat Penelitian)

1.4.2.1. Menambah referensi tentang pemanfaatan senyawa metabolit sekunder Cengkeh (*Syzygium aromaticum*) yang bisa digunakan sebagai calon obat baru untuk pengobatan diabetes melitus tipe 2.

1.4.3. Bagi Masyarakat

1.4.3.1. Dapat menjadi alternatif pengobatan diabetes melitus tipe 2 dari bahan alam yang toksisitasnya lebih rendah daripada obat kimia konvensional.

1.5. Keaslian Penelitian

Tabel 1. 1 Keaslian Penelitian

Nama Peneliti, Tahun Peneliti	Judul Penelitian	Metode Penelitian	Hasil Penelitian	Perbedaan dan Persamaan dengan Penelitian ini
(Sagitasa et al., 2021)	Studi *In silico* Senyawa Aktif Daun Singawalang (*Petiveria alliacea*) Sebagai Penurun Kadar Glukosa Darah Untuk Pengobatan Penyakit Diabetes Melitus Tipe-2	*In silico*	Hasil penambatan molekuler senyawa aktif singawalang terhadap reseptor AMP-K menunjukan 3 ligan uji terbaik dengan nilai energi bebas ikatan (ΔG) yang lebih rendah dibandingkan pembanding. Metformin memiliki energi bebas	Perbedaan : - Tanaman yang digunankan Persamaan : - Metode digunakan

Nama Peneliti, Tahun Peneliti	Judul Penelitian	Metode Penelitian	Hasil Penelitian	Perbedaan dan Persamaan dengan Penelitian ini
			ikatan sebesar -5,16 kcal/mol. Isoarborionl asetat, isoarborinol, dan benzyl 2-hydroxymethyl trisulphide memiliki masing-masing energi ikatan -7,57 kkal, -7,45 kkal, dan -5,95 kkal.	
(Rahma Rumata *et al*., 2021)	Studi Penambatan Senyawa Dari Tanaman Kembang Bulan (*Tithonia diversifolia (Hemsley) A. Gray*) Terhadap *Peroxisome ProliferatorActivated Receptor-Gamma* (PPARγ) Untuk Penyakit Diabetes Melitus	*In silico*	Hasil docking molekuler menunjukkan bahwa dari 34 senyawa kembang bulan yang diuji, semuanya memiliki kemampuan untuk berinteraksi dengan reseptor PPAR-γ. Interaksi paling kuat terlihat pada senyawa 27, 29, dan 31, dengan nilai energi pengikatan masing-masing adalah -8,03 kkal/mol, -6,85 kkal/mol, dan -8,20 kkal/mol.	Perbedaan : - Tanaman yang digunakan Persamaan : - Metode dan target protein yang digunakan
(Mohtar et al., 2021)	Studi *In Silico* Senyawa Eugenol Cengkeh (*Syzygium aromaticum L.*) Terhadap Reseptor Er-α, Er-β dan HER-2 Pada Kanker Payudara	*In silico*	Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan didapatkan hasil bahwa ligan eugenol sebagai senyawa	Perbedaan : - Penyakit dan Target protein yang digunakan Persamaan :

Nama Peneliti, Tahun Peneliti	Judul Penelitian	Metode Penelitian	Hasil Penelitian	Perbedaan dan Persamaan dengan Penelitian ini
			identitas dalam cengkeh berpotensi secara in silico sebagai antikanker terhadap reseptor ER-α, ER-β dan Her-2 pada kanker payudara dengan hasil interaksi diperoleh nilai RMSD 0,000 Å pada setiap reseptor dan binding affinity secara berturut-turut yaitu -5.7 kkal/mol, -6.3 kkal/mol, dan -6,3 kkal/mol	- Metode dan tanaman yang digunakan

DAFTAR PUSTAKA

Accelrys Enterprise Platform. (2005). Introduction to the Discovery Studio Visualizer. *Accelys Software Inc*.

Adiputra, R. (2023). Efek samping penggunaan obat anti diabetes jangka panjang : sebuah meta analisis. *Jurnal Kesehatan Tambusai*, *4*(3), 3951–3959.

Agroekoteknologi, J., Universitas, A., & Ratulangi, S. (2022). *Jurnal agroekoteknologi terapan*. *3*, 153–166.

Alam El-Din, H. M., Loutfy, S. A., Fathy, N., Elberry, M. H., Mayla, A. M., Kassem, S., & Naqvi, A. (2016). Open access Molecular docking based screening of compounds against VP40 from Ebola virus. *Bioinformation*, *12*(3), 192–196. http://www.rcsb.org

Alexander, G. (2020). *Biodiversity in Indonesia*. Biodiversity Warriors.

Alfian, A., Mahulette, A. S., Zainal, M., Hardin, & Bahrun, A. H. (2019). Morphological character of raja clove (Syzygium aromaticum L . Merr & Perry .) native from Ambon Morphological character of raja clove (Syzygium aromaticum L . Merr & Perry .) native from Ambon Island. *IOP Publishing*. https://doi.org/10.1088/1755-1315/343/1/012150

An, H., & He, L. (2016). Current understanding of metformin effect on the control of hyperglycemia in diabetes. *The Journal of Endocrinology*, *228*(3), R97-106. https://doi.org/10.1530/JOE-15-0447

Arciniega, M. (2018). *olecular docking : current advances and challenges*. *21*, 65–87. https://doi.org/10.22201/fesz.23958723e.2018.0.143

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

Banerjee, P., Kemmler, E., Dunkel, M., & Preissner, R. (2024). *ProTox 3 . 0 : a w ebserv er f or the prediction of t oxicity of*. *April*, 513–520.

Batiha, G. E. S., Alkazmi, L. M., Wasef, L. G., Beshbishy, A. M., Nadwa, E. H., &

Rashwan, E. K. (2020). Syzygium aromaticum l. (myrtaceae): Traditional uses, bioactive chemical constituents, pharmacological and toxicological activities. *Biomolecules*, *10*(2). https://doi.org/10.3390/biom10020202

Brünger, A. T. (2019). Free R value: a novel statistical quantity for assessing the accuracy of crystal structures. *Nature*, *355*(6359), 472–475. https://doi.org/10.1038/355472a0

Capuano, A., Sportiello, L., Maiorino, M. I., Rossi, F., Giugliano, D., & Esposito, K. (2013). Dipeptidyl peptidase-4 inhibitors in type 2 diabetes therapy - Focus on alogliptin. *Drug Design, Development and Therapy*, *7*, 989–1001. https://doi.org/10.2147/DDDT.S37647

Chagas, C. M., Moss, S., & Alisaraie, L. (2018). Drug metabolites and their effects on the development of adverse reactions: Revisiting Lipinski's Rule of Five. *International Journal of Pharmaceutics*, *549*(1), 133–149. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2018.07.046

Chandra, M., Miriyala, S., & Panchatcharam, M. (2017). PPARγ and Its Role in Cardiovascular Diseases. *PPAR Research*, *2017*, 6404638. https://doi.org/10.1155/2017/6404638

Choi, B. C. K., & Shi, F. (2015). Risk factors for diabetes mellitus by age and sex: Results of the National Population Health Survey. *Diabetologia*, *44*(10), 1221–1231. https://doi.org/10.1007/s001250100648

Daina, A., Michielin, O., & Zoete, V. (2017). SwissADME: A free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. *Scientific Reports*, *7*(January), 1–13. https://doi.org/10.1038/srep42717

Dauter, Z. (2023). Protein Structures at Atomic Resolution. In *Macromolecular Crystallography, Part C* (Vol. 368, pp. 288–337). Academic Press. https://doi.org/https://doi.org/10.1016/S0076-6879(03)68016-X

Deacon, C. F. (2020). Dipeptidyl peptidase 4 inhibitors in the treatment of type 2 diabetes mellitus. *Nature Reviews Endocrinology*, *16*(11), 642–653. https://doi.org/10.1038/s41574-020-0399-8

Doak, B. C., Over, B., Giordanetto, F., & Kihlberg, J. (2014). Oral druggable space

beyond the rule of 5: Insights from drugs and clinical candidates. *Chemistry and Biology*, *21*(9), 1115–1142. https://doi.org/10.1016/j.chembiol.2014.08.013

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

Fakih, T. M., Putri, N. W. R. P., Marillia, V., Ramadhan, D. S. F., & Darusman, F. (2022). Identifikasi Aktivitas Biologis, Prediksi Toksisitas, dan Molecular Docking Senyawa Jubanine dari Tanaman Bidara Arab sebagai Kandidat Antivirus SARS-CoV-2. *Jurnal Riset Kimia*, *13*(1), 111–121. https://doi.org/10.25077/jrk.v13i1.437

Fang, L., Zhang, M., Li, Y., Liu, Y., Cui, Q., & Wang, N. (2016). PPARgene: A Database of Experimentally Verified and Computationally Predicted PPAR Target Genes. *PPAR Research*, *2016*, 6042162. https://doi.org/10.1155/2016/6042162

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*, *14*(2), 84–90.

Frimayanti, N., Lukman, A., & Nathania, L. (2021). Studi molecular docking senyawa 1,5-benzothiazepine sebagai inhibitor dengue DEN-2 NS2B/NS3 serine protease. *Chempublish Journal*, *6*(1), 54–62. https://doi.org/10.22437/chp.v6i1.12980

Frimayanti, N., Mora, E., & Anugrah, R. (2018). Study of Molecular Docking of Chalcone Analoque Compound as Inhibitors for Liver Cancer Cells HepG2. *Computer Engineering and Applications Journal*, *7*(2), 137–147. https://doi.org/10.18495/comengapp.v7i2.260

Frimayanti Neni, M. E. A. R. (2018). Study of Molecular Docking of Chalcone Analoque Compound as Inhibitors for Liver Cancer Cells HepG2. *Computer Engineering and Applications Journal*.

Hakiki, A. (2024). *Studi Molecular Docking dan Prediksi ADMET Senyawa Turunan Kurkumin Sebagai Inhibitor Kasein Kinase 2- α*. *5*(2).

Han, L., Shen, W.-J., Bittner, S., Kraemer, F. B., & Azhar, S. (2017). PPARs: regulators of metabolism and as therapeutic targets in cardiovascular disease. Part II: PPAR-β/δ and PPAR-γ. *Future Cardiology*, *13*(3), 279–296. https://doi.org/10.2217/fca-2017-0019

Huey, R., Morris, G. M., Olson, A. J., & Goodsell, D. S. (2007). A semiempirical free energy force field with charge-based desolvation. *Journal of Computational Chemistry*, *28*(6), 1145–1152. https://doi.org/10.1002/jcc.20634

Inzucchi, S. E., Bergenstal, R. M., Buse, J. B., Diamant, M., Ferrannini, E., Nauck, M., Peters, A. L., Tsapas, A., Wender, R., & Matthews, D. R. (2015). Management of hyperglycemia in type 2 diabetes, 2015: a patient-centered approach: update to a position statement of the American Diabetes Association and the European Association for the Study of Diabetes. *Diabetes Care*, *38*(1), 140–149. https://doi.org/10.2337/dc14-2441

Izatunnafis, murti Bayu, Y., Sulistyo, B., & Sudarmanto, A. (2023). *In silico Pharmacokinetic and Toxicity Prediction of Compounds from Andrographis Paniculata (Burm . F .)*. *11*(2), 830–838.

Izzaturahmi, A. S., Pauziah, A. S. U., Virliana, A., Sitinjak, G. M. L., Ramadhiany, Z. Z., Elaine, A. A., Sitinjak, B. D. P., & Aulifa, D. L. (2023). Indonesian Journal of Biological Pharmacy In Silico Study of Licorice (Glycyrrhiza glabra L.) on VEGFR-2 Receptors in Breast Cancer. *Indonesian Journal of Biological Pharmacy*, *3*(3), 137–153. https://jurnal.unpad.ac.id/ijbp

Kadowaki, T., Tajima, N., Odawara, M., Nishii, M., Taniguchi, T., & Ferreira, J. C. A. (2016). Addition of sitagliptin to ongoing metformin monotherapy improves glycemic control in Japanese patients with type 2 diabetes over 52weeks. *Journal of Diabetes Investigation*, *4*(2), 174–181. https://doi.org/10.1111/jdi.12001

kemenkes RI. (2020). *PEDOMAN NASIONAL PELAYANAN KEDOKTERAN TATA LAKSANA DIABETES MELITUS TIPE 2 DEWASA*. *21*(1), 1–9.

Kementerian Pertanian. (2022). Outlook Komoditas Perkebunan Cengkeh. *Pusat Data Dan Sidtem Informasi Pertanian Sekertariat Jenderal - Kementerian Pertanian*, 1–97.

Kroker, A. J., & Bruning, J. B. (2015). Review of the Structural and Dynamic Mechanisms of PPARγ Partial Agonism. *PPAR Research*, *2015*, 816856. https://doi.org/10.1155/2015/816856

Marín-Peñalver, J. J., Martín-Timón, I., Sevillano-Collantes, C., & Del Cañizo-Gómez, F. J. (2016). Update on the treatment of type 2 diabetes mellitus. *World Journal of Diabetes*, *7*(17), 354–395. https://doi.org/10.4239/wjd.v7.i17.354

Mohtar, K., Fatimawali, Rumondor, E. M., Datu, O. S., & Tallei, T. (2021). Studi In Silico Senyawa Eugenol Cengkeh (Syzygium Aromaticum L.) Terhadap Reseptor Er-?, Er-? dan Her-2 pada Kanker Payudara. *Pharmacon*, *10*(3), 1001–1008.

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

Mukesh, B., & Rakesh, K. (2011). ISSN 2229-3566 Review Article MOLECULAR DOCKING : A REVIEW Bachwani Mukesh *, Kumar Rakesh. *International Journal of Research in Ayurveda & Pharmacy*, *2*(6), 1746–1751.

Mustapa, M. A. (2020). *PENELUSURAN SENYAWA TUMBUHAN CENGKEH*.

Nursanti, O., Isna, W., & Ginayanti, H. (2022). (Cymbopogon citratus) Sebagai Ligan Aktif Reseptor Pparγ. *Jurnal Farmasi Higea*, *14*(1).

Pagadala, N. S., Syed, K., & Tuszynski, J. (2017). Software for molecular docking: a review. *Biophysical Reviews*, *9*(2), 91–102. https://doi.org/10.1007/s12551-016-0247-1

Pantsar, T., & Poso, A. (2018). Binding affinity via docking: Fact and fiction. *Molecules*, *23*(8), 1DUMMY. https://doi.org/10.3390/molecules23081899

perkeni. (2021). *Pedoman Pengelolaan dan pencegahan diabetes melitus tipe 2 di indonesia*.

Pires, D. E. V, Blundell, T. L., & Ascher, D. B. (2015). pkCSM: Predicting Small-Molecule Pharmacokinetic and Toxicity Properties Using Graph-Based Signatures. *Journal of Medicinal Chemistry*, *58*(9), 4066–4072. https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.5b00104

Putu, N., Primananda, W., Hanggaresty, D., Adi, A., Putra, P., & Warditiani, N. K. (2022). Docking Molekuler ?-Sitosterol Dengan Protein Dipeptidylpeptidase-4 (Dpp-4) Sebagai Antiheperglikemia Secara in Silicodocking Molekuler ?-Sitosterol Dengan Protein Dipeptidylpeptidase-4 (Dpp-4) Sebagai Antiheperglikemia Secara in Silico. *CAKRA KIMIA (Indonesian E-Journal of Applied Chemistry)*, *10*(1), 10–16. https://ojs.unud.ac.id/index.php/cakra/article/view/88908

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

Rahma Rumata, N., Nursamsiar, & Arifin, M. P. (2021). Studi Penambatan Senyawa Dari Tanaman Kembang Bulan (Tithonia diversifolia (Hemsley) A. Gray) Terhadap Peroxisome Proliferator-Activated Receptor-Gamma (PPARγ) Untuk Penyakit Diabetes Melitus The study of the binding of compounds from the Kembang Bulan (T. *Journal of Pharmaceutical and Medicinal Sciences*, *2022*(2), 28–32.

Retnowati, A., Rugayah, Rahajoe, J. S., & Arifiani, D. (2019). Status Keanekaragaman Hayati Indonesia : Kekayaan Jenis Tumbuhan dan Jamur Indonesia. In *LIPI Press*.

Roden, M., & Shulman, G. I. (2019). The integrative biology of type 2 diabetes. *Nature*, *576*(7785), 51–60. https://doi.org/10.1038/s41586-019-1797-8

Rose, P. W., Prlić, A., Bi, C., Bluhm, W. F., Christie, C. H., Dutta, S., Green, R. K., Goodsell, D. S., Westbrook, J. D., Woo, J., Young, J., Zardecki, C., Berman, H. M., Bourne, P. E., & Burley, S. K. (2015). The RCSB Protein Data Bank: views of structural biology for basic and applied research and education. *Nucleic Acids Research*, *43*(Database issue), D345-56.

https://doi.org/10.1093/nar/gku1214

Ruslin, Putri, S. R., & Arba, M. (2019). Pemodelan Homologi Protein Receptor Orphan Receptor-1 (ROR-1) Sebagai Target Terapi Chronic Lymphocytic Leukemia (CLL) Ruslin, Suci Rahmawati Putri, Muhammad Arba. *Pharmauho*, *5*(1), 7–12.

Sagitasa, S., Elizabeth, K., Sulaeman, L. I., Rafasafly, A., Syafra, D. W., Kristande, A., & Muchtaridi, M. (2021). Chimica et Natura Acta Studi In Silico Senyawa Aktif Daun Singawalang (Petiveria alliacea). *Chimica et Natura Acta*, *9*(2), 58–66.

Sailapathi, A., Murugan, G., Somarathinam, K., Gunalan, S., Jagadeesan, R., Yoosuf, N., Kanagaraj, S., & Kothandan, G. (2020). Proposing the Promiscuous Protein Structures in JNK1 and JNK3 for Virtual Screening in Pursuit of Potential Leads. *ACS Omega*, *5*(8), 3969–3978. https://doi.org/10.1021/acsomega.9b03458

Santoso, B. (2017). Pengaruh Volume Gridbox pada Docking Senyawa dalam Stelechocarpus Burahol terhadap Protein Homolog Antiinflamasi TRPV1. *Urecol*, *September*, 321–328. https://journal.unimma.ac.id/index.php/urecol/article/view/1369

Saputri, K. E., Fakhmi, N., Kusumaningtyas, E., Priyatama, D., & Santoso, B. (2016). Docking Molekular Potensi Anti Diabetes Melitus Tipe 2 Turunan Zerumbon Sebagai Inhibitor Aldosa Reduktase Dengan Autodock-Vina. *Chimica et Natura Acta*, *4*(1), 16. https://doi.org/10.24198/cna.v4.n1.10443

Sari, I. W., Junaidin, J., & Pratiwi, D. (2020). STUDI MOLECULAR DOCKING SENYAWA FLAVONOID HERBA KUMIS KUCING (Orthosiphon stamineus B.) PADA RESEPTOR α-GLUKOSIDASE SEBAGAI ANTIDIABETES TIPE 2. *Jurnal Farmagazine*, *7*(2), 54. https://doi.org/10.47653/farm.v7i2.194

Sari, N. E., Yusuf, E., Sabila, A., Farmasita, R., & Nopratilova, N. (2023). Potensi Interaksi Obat-Obat yang Dimediasi Sitokrom P450 pada Pasien Geriatri di Rawat Inap Rumah Sakit X. *Health Information : Jurnal Penelitian*, *15*(2), 1–7.

Simatupang, R., & Kristina, M. (2023). PENYULUHAN TENTANG DIABETES MELITUS PADA LANSIA PENDERITA DM. *JPM Jurnal Pengabdian Mandiri Vol.2, No.3, Maret 2023*, *2*(3), 310–324. https://bnr.bg/post/101787017/bsp-za-balgaria-e-pod-nomer-1-v-buletinata-za-vota-gerb-s-nomer-2-pp-db-s-nomer-12

Siswandono. (2016). *kimia medisinal 1 edisi 2*. airlangga university press.

Sobolev, O. V, Afonine, P. V, Moriarty, N. W., Hekkelman, M. L., Joosten, R. P., Perrakis, A., Adams, P. D., Sobolev, O. V, Afonine, P. V, Moriarty, N. W., Hekkelman, M. L., & Joosten, R. P. (2020). Resource A Global Ramachandran Score Identifies Protein Structures with Unlikely Stereochemistry ll Resource A Global Ramachandran Score Identifies Protein Structures with Unlikely Stereochemistry. *Structure/Folding and Design*, *28*(11), 1249-1258.e2. https://doi.org/10.1016/j.str.2020.08.005

Sugiharto, M. I., Bintari, Y. R., & Damayanti, D. S. (2021). Mekanisme Senyawa Aktif Daun Sirsak (Annona muricata Linn.) Sebagai Anti Diabetes : Studi In Silico. *Jurnal Kedokteran Komunitas*, *9*(2), 1–13.

Surbakti, C., Ginting, P. A. B., Abadi, H., & Duha, Y. (2022). Uji Aktivitas Antidiabetes Ekstrak Etanol Daun Cengkeh (Syzygium aromaticum) Terhadap Tikus Putih Jantan dan Gambaran Histologi Pankreas. *Jurnal Farmasi Indonesia*, *19*(1), 161–168. https://doi.org/10.31001/jfi.v19i1.1375

Torres, C., Varela, P., Verónica, M., & Flores-morales, P. (2017). Q uímica educación y Orgánica. *Educación Química*, *28*(2), 91–98. https://doi.org/10.1016/j.eq.2016.08.004

Wattimena, A. Y., Mahulette, A. S., Makaruku, M. H., & Fajri, M. (2023). *Morphological Character of Clove " Raja " (Syzygium aromaticum L .), Endemic to Maluku , Indonesia*. *10*(1).

Yeni, Y., & Rachmania, R. A. (2022). The Prediction of Pharmacokinetic Properties of Compounds in Hemigraphis alternata (Burm.F.) T. Ander Leaves Using pkCSM. *Indonesian Journal of Chemistry*, *22*(4), 1081–1089. https://doi.org/10.22146/ijc.73117

Zardecki, C., Dutta, S., Goodsell, D. S., Lowe, R., Voigt, M., & Burley, S. K.

(2022). PDB-101: Educational resources supporting molecular explorations through biology and medicine. *Protein Science*, *31*(1), 129–140. https://doi.org/10.1002/pro.4200

Zulcafli, A. S., Lim, C., Ling, A. P., Chye, S., & Koh, R. (2020). Antidiabetic potential of syzygium sp.: An overview. *Yale Journal of Biology and Medicine*, *93*(2), 307–325.

LAMPIRAN

Lampiran 1. Hasil *Binding affinity Analisis Docking*

1. 5T4B 2-Heptanone

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	33	-3.80	00.00	74.57.00	RANKING
1	2	38	-3.79	0,047917	74.56.00	RANKING
1	3	7	-3.77	0,066667	74.29.00	RANKING
1	4	81	-3.77	01.10	74.24.00	RANKING
1	5	63	-3.77	01.10	74.21.00	RANKING
1	6	77	-3.76	0,109028	73.98	RANKING
1	7	93	-3.76	0,053472	74.69	RANKING
1	8	85	-3.76	01.11	74.28.00	RANKING
1	9	24	-3.76	01.09	74.20.00	RANKING
1	10	19	-3.74	01.09	74.29.00	RANKING
1	11	47	-3.74	01.06	74.25.00	RANKING
1	12	45	-3.74	01.08	74.47.00	RANKING
1	13	53	-3.73	00.30	74.60	RANKING
1	14	98	-3.72	0,107639	73.93	RANKING
1	15	56	-3.71	01.20	74.39.00	RANKING
1	16	71	-3.71	0,109028	73.92	RANKING
1	17	44	-3.71	01.00	74.22.00	RANKING
1	18	49	-3.71	01.12	74.34.00	RANKING
1	19	27	-3.70	01.18	74.09.00	RANKING
1	20	36	-3.70	0,109028	74.01.00	RANKING
1	21	28	-3.70	0,103472	74.04.00	RANKING
1	22	78	-3.69	01.25	74.12.00	RANKING
1	23	59	-3.69	01.22	74.33.00	RANKING
1	24	13	-3.69	01.24	74.12.00	RANKING
1	25	91	-3.69	01.00	74.26.00	RANKING
1	26	84	-3.68	0,067361	74.40.00	RANKING
1	27	52	-3.68	01.14	74.29.00	RANKING
1	28	15	-3.67	01.18	74.28.00	RANKING
1	29	21	-3.67	01.13	74.17.00	RANKING
1	30	42	-3.67	0,102778	74.08.00	RANKING
1	31	35	-3.67	01.06	74.20.00	RANKING
1	32	41	-3.67	0,065278	74.33.00	RANKING
1	33	87	-3.66	01.07	74.17.00	RANKING
1	34	94	-3.65	01.10	74.16.00	RANKING
1	35	57	-3.65	0,106944	74.00.00	RANKING
1	36	14	-3.65	0,089583	74.11.00	RANKING
1	37	97	-3.64	01.08	74.33.00	RANKING
1	38	64	-3.63	01.17	74.29.00	RANKING
1	39	25	-3.63	0,093056	74.07.00	RANKING
1	40	8	-3.63	01.24	74.07.00	RANKING
1	41	73	-3.63	01.06	74.27.00	RANKING
1	42	82	-3.63	0,06875	74.16.00	RANKING
1	43	67	-3.62	0,066667	74.25.00	RANKING
1	44	34	-3.62	0,101389	73.90	RANKING
1	45	86	-3.62	01.08	74.16.00	RANKING

1	46	39	-3.62	01.13	74.09.00	RANKING
1	47	6	-3.61	0,09375	74.47.00	RANKING
1	48	100	-3.61	0,101389	73.89	RANKING
1	49	72	-3.57	0,107639	74.25.00	RANKING
1	50	3	-3.56	01.13	74.15.00	RANKING
1	51	70	-3.55	0,096528	73.97	RANKING
1	52	69	-3.55	01.06	74.25.00	RANKING
1	53	74	-3.54	0,109028	73.96	RANKING
1	54	50	-3.53	02.00	74.15.00	RANKING
1	55	60	-3.53	01.24	74.11.00	RANKING
1	56	16	-3.52	01.04	74.15.00	RANKING
1	57	32	-3.51	0,107639	73.77	RANKING
1	58	37	-3.47	0,109722	73.93	RANKING
1	59	75	-3.47	0,064583	74.22.00	RANKING
1	60	88	-3.46	01.50	74.53.00	RANKING
1	61	31	-3.46	0,105556	74.41.00	RANKING
1	62	1	-3.36	0,091667	75.02.00	RANKING
1	63	18	-3.33	01.49	74.46.00	RANKING
2	1	22	-3.75	00.00	73.90	RANKING
2	2	40	-3.71	00.54	73.85	RANKING
2	3	11	-3.71	0,047222	73.91	RANKING
2	4	17	-3.70	00.52	73.78	RANKING
2	5	65	-3.68	00.56	73.87	RANKING
2	6	54	-3.65	0,047222	73.86	RANKING
2	7	96	-3.65	0,044444	73.98	RANKING
2	8	5	-3.64	00.39	73.87	RANKING
2	9	4	-3.64	0,058333	74.01.00	RANKING
2	10	43	-3.62	0,054167	74.01.00	RANKING
2	11	66	-3.61	0,057639	73.82	RANKING
2	12	90	-3.61	0,050694	73.84	RANKING
2	13	10	-3.61	00.59	73.77	RANKING
2	14	92	-3.61	00.47	73.90	RANKING
2	15	48	-3.59	0,055556	73.94	RANKING
2	16	99	-3.59	0,042361	73.85	RANKING
2	17	79	-3.56	0,045139	73.88	RANKING
2	18	23	-3.53	0,050694	74.03.00	RANKING
2	19	9	-3.50	0,095139	74.02.00	RANKING
2	20	20	-3.46	0,054861	73.79	RANKING
3	1	76	-3.69	00.00	71.74	RANKING
3	2	12	-3.67	00.29	71.77	RANKING
3	3	68	-3.67	00.52	71.82	RANKING
3	4	61	-3.65	0,101389	71.80	RANKING
3	5	83	-3.64	0,107639	71.75	RANKING
3	6	62	-3.62	00.51	71.65	RANKING
3	7	55	-3.62	0,103472	71.81	RANKING
3	8	29	-3.61	0,107639	71.69	RANKING
3	9	2	-3.59	0,052083	71.72	RANKING
3	10	30	-3.58	0,10625	71.72	RANKING
3	11	46	-3.57	0,10625	71.65	RANKING
3	12	58	-3.57	0,048611	71.84	RANKING
3	13	51	-3.55	0,053472	71.62	RANKING
3	14	26	-3.53	0,050694	71.51.00	RANKING
3	15	95	-3.52	0,097917	71.60	RANKING

3	16	80	-3.47	0,046528	71.59.00	RANKING
4	1	89	-3.64	00.00	71.70	RANKING

2. 5T4B 5-Hydroxytryptamine

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	46	-7.76	00.00	72.52.00	RANKING
1	2	36	-7.74	00.06	72.52.00	RANKING
1	3	72	-7.74	00.08	72.56.00	RANKING
1	4	8	-7.73	00.07	72.52.00	RANKING
1	5	31	-7.72	00.12	72.62	RANKING
1	6	38	-7.71	00.17	72.61	RANKING
1	7	37	-7.70	00.10	72.54.00	RANKING
1	8	76	-7.69	0,043056	72.86	RANKING
1	9	73	-7.68	00.15	72.60	RANKING
1	10	9	-7.68	00.10	72.48.00	RANKING
1	11	70	-7.64	0,044444	72.86	RANKING
1	12	12	-7.64	00.20	72.52.00	RANKING
1	13	25	-7.63	00.23	72.62	RANKING
1	14	80	-7.63	00.31	72.57.00	RANKING
1	15	53	-7.60	0,04375	72.83	RANKING
1	16	85	-7.52	00.55	72.76	RANKING
1	17	18	-7.41	0,045833	72.77	RANKING
1	18	23	-7.39	00.57	72.52.00	RANKING
1	19	78	-7.38	0,045833	72.80	RANKING
1	20	28	-7.37	0,067361	72.31.00	RANKING
1	21	99	-7.36	01.00	72.35.00	RANKING
1	22	64	-7.35	0,048611	72.72	RANKING
1	23	15	-7.34	0,05	72.79	RANKING
1	24	90	-7.31	01.03	72.26.00	RANKING
1	25	98	-7.31	0,051389	72.86	RANKING
1	26	82	-7.31	0,04375	72.81	RANKING
1	27	66	-7.29	0,050694	72.89	RANKING
1	28	48	-7.29	0,052778	72.86	RANKING
1	29	88	-7.28	0,051389	72.89	RANKING
1	30	27	-7.28	0,050694	72.85	RANKING
1	31	24	-7.27	0,053472	72.73	RANKING
1	32	32	-7.27	0,051389	72.82	RANKING
1	33	33	-7.26	0,051389	72.90	RANKING
1	34	1	-7.25	0,05625	72.74	RANKING
1	35	39	-7.25	0,060417	72.90	RANKING
1	36	65	-7.19	01.22	72.28.00	RANKING
1	37	2	-7.17	0,054861	72.80	RANKING
1	38	96	-7.14	00.29	72.48.00	RANKING
1	39	67	-7.10	00.47	72.45.00	RANKING
1	40	59	-7.06	01.21	72.09.00	RANKING
1	41	22	-7.05	00.55	72.19.00	RANKING
1	42	58	-6.96	01.28	72.28.00	RANKING
1	43	68	-6.93	0,099306	72.28.00	RANKING
1	44	21	-6.87	01.20	72.68	RANKING
1	45	74	-6.87	01.35	72.73	RANKING
1	46	45	-6.86	01.04	72.88	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	47	34	-6.83	01.19	72.70	RANKING
1	48	97	-6.81	01.46	72.81	RANKING
1	49	3	-6.80	01.24	72.74	RANKING
1	50	19	-6.75	0,099306	72.25.00	RANKING
1	51	62	-6.74	0,090972	72.76	RANKING
1	52	55	-6.72	0,103472	71.97	RANKING
2	1	29	-7.29	00.00	72.06.00	RANKING
2	2	44	-7.28	00.14	71.98	RANKING
2	3	69	-7.24	00.14	72.07.00	RANKING
2	4	49	-7.23	00.22	71.95	RANKING
2	5	26	-7.22	00.15	72.06.00	RANKING
2	6	79	-7.22	00.16	72.07.00	RANKING
2	7	14	-7.19	00.25	72.02.00	RANKING
2	8	100	-7.18	00.26	72.12.00	RANKING
2	9	6	-7.18	00.25	72.08.00	RANKING
2	10	50	-7.17	00.25	71.98	RANKING
2	11	20	-7.14	00.24	72.11.00	RANKING
2	12	43	-7.08	00.38	71.99	RANKING
2	13	10	-7.05	00.49	72.22.00	RANKING
2	14	84	-7.04	0,04375	72.34.00	RANKING
2	15	81	-7.03	0,041667	72.29.00	RANKING
2	16	57	-7.02	00.50	72.26.00	RANKING
2	17	60	-6.96	0,043056	72.35.00	RANKING
2	18	47	-6.18	01.52	72.30.00	RANKING
3	1	13	-6.73	00.00	71.33.00	RANKING
3	2	56	-6.65	00.45	71.52.00	RANKING
3	3	91	-6.65	00.47	71.54.00	RANKING
3	4	92	-6.60	00.55	71.48.00	RANKING
3	5	51	-6.60	00.31	71.25.00	RANKING
3	6	86	-6.59	0,108333	72.28.00	RANKING
3	7	30	-6.59	00.29	71.29.00	RANKING
3	8	63	-6.57	0,110417	72.22.00	RANKING
3	9	75	-6.57	0,054861	71.57.00	RANKING
3	10	5	-6.57	0,044444	71.73	RANKING
3	11	42	-6.53	0,043056	71.58.00	RANKING
3	12	71	-6.50	0,046528	71.57.00	RANKING
3	13	35	-6.41	0,066667	71.54.00	RANKING
3	14	95	-6.40	0,042361	71.29.00	RANKING
3	15	77	-6.31	0,065972	71.40.00	RANKING
3	16	89	-6.29	01.08	71.52.00	RANKING
3	17	41	-6.15	01.19	71.38.00	RANKING
4	1	93	-6.63	00.00	72.15.00	RANKING
4	2	83	-6.52	00.30	72.21.00	RANKING
5	1	52	-6.42	00.00	71.69	RANKING
5	2	40	-6.37	00.55	71.64	RANKING
5	3	4	-6.35	00.56	71.68	RANKING
5	4	54	-6.34	00.58	71.70	RANKING
5	5	94	-6.34	0,054861	71.59.00	RANKING
5	6	87	-6.32	0,0625	71.48.00	RANKING
5	7	11	-6.31	01.01	71.05.00	RANKING
5	8	61	-6.31	01.15	71.45.00	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
5	9	7	-6.30	0,049306	71.59.00	RANKING
5	10	17	-6.17	01.02	71.05.00	RANKING
5	11	16	-6.15	0,090972	71.20.00	RANKING

3. 5T4B Kaempferol

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	2	52	-6.81	00.07	70.42.00	RANKING
1	3	70	-6.79	00.14	70.43.00	RANKING
1	4	100	-6.78	00.18	70.44.00	RANKING
1	5	99	-6.77	00.15	70.39.00	RANKING
1	6	26	-6.77	00.12	70.41.00	RANKING
1	7	17	-6.77	00.11	70.42.00	RANKING
1	8	81	-6.77	00.11	70.42.00	RANKING
1	9	74	-6.76	00.16	70.49.00	RANKING
1	10	19	-6.76	00.46	70.24.00	RANKING
1	11	10	-6.76	00.52	70.20.00	RANKING
1	12	83	-6.75	00.23	70.34.00	RANKING
1	13	92	-6.75	00.51	70.21.00	RANKING
1	14	1	-6.74	00.49	70.22.00	RANKING
1	15	11	-6.73	00.47	70.24.00	RANKING
1	16	36	-6.72	00.24	70.50.00	RANKING
1	17	82	-6.70	00.28	70.52.00	RANKING
1	18	47	-6.70	00.55	70.17.00	RANKING
1	19	89	-6.70	00.57	70.14.00	RANKING
1	20	91	-6.69	00.56	70.15.00	RANKING
1	21	21	-6.29	00.36	70.52.00	RANKING
1	22	28	-6.27	00.41	70.53.00	RANKING
1	23	55	-6.26	0,043056	70.50.00	RANKING
1	24	84	-6.26	00.38	70.53.00	RANKING
1	25	56	-6.25	0,047222	70.49.00	RANKING
1	26	80	-6.25	0,048611	70.50.00	RANKING
1	27	77	-6.25	00.38	70.50.00	RANKING
1	28	59	-6.25	0,042361	70.51.00	RANKING
1	29	86	-6.24	00.41	70.51.00	RANKING
1	30	31	-6.24	0,05625	70.53.00	RANKING
1	31	3	-6.24	00.38	70.54.00	RANKING
1	32	48	-6.24	0,05625	70.53.00	RANKING
1	33	63	-6.24	0,045833	70.53.00	RANKING
1	34	43	-6.24	00.39	70.51.00	RANKING
1	35	72	-6.24	0,056944	70.52.00	RANKING
1	36	15	-6.23	00.41	70.49.00	RANKING
1	37	76	-6.23	00.56	70.51.00	RANKING
1	38	14	-6.23	0,05625	70.53.00	RANKING
1	39	33	-6.23	0,052083	70.55.00	RANKING
1	40	8	-6.23	0,060417	70.54.00	RANKING
1	41	75	-6.22	0,048611	70.54.00	RANKING
1	42	30	-6.22	00.45	70.62	RANKING
1	43	18	-6.22	00.34	70.47.00	RANKING
1	44	62	-6.21	00.47	70.63	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	45	44	-6.21	00.33	70.46.00	RANKING
1	46	45	-6.21	00.32	70.47.00	RANKING
1	47	5	-6.20	0,063194	70.55.00	RANKING
1	48	68	-6.19	00.34	70.49.00	RANKING
1	49	73	-6.19	00.51	70.66	RANKING
1	50	67	-6.19	0,064583	70.53.00	RANKING
1	51	34	-6.18	00.32	70.47.00	RANKING
1	52	23	-6.18	0,065278	70.55.00	RANKING
1	53	24	-6.18	0,063194	70.53.00	RANKING
1	54	98	-6.18	00.36	70.58.00	RANKING
1	55	4	-6.18	00.42	70.53.00	RANKING
1	56	93	-6.17	00.33	70.46.00	RANKING
1	57	85	-6.17	0,068056	70.47.00	RANKING
1	58	20	-6.16	0,068056	70.48.00	RANKING
1	59	42	-6.16	01.00	70.44.00	RANKING
1	60	54	-6.16	0,06875	70.44.00	RANKING
1	61	6	-6.16	00.35	70.52.00	RANKING
1	62	51	-6.16	01.02	70.43.00	RANKING
1	63	87	-6.15	01.05	70.45.00	RANKING
1	64	95	-6.15	00.36	70.53.00	RANKING
1	65	71	-6.14	00.37	70.42.00	RANKING
1	66	12	-6.14	01.08	70.42.00	RANKING
1	67	78	-6.14	01.08	70.44.00	RANKING
1	68	27	-6.14	01.05	70.47.00	RANKING
1	69	64	-6.14	00.38	70.44.00	RANKING
1	70	2	-6.13	01.09	70.43.00	RANKING
1	71	46	-6.13	0,06875	70.38.00	RANKING
1	72	65	-6.13	01.06	70.47.00	RANKING
1	73	61	-6.12	01.00	70.37.00	RANKING
1	74	53	-6.11	01.11	70.44.00	RANKING
1	75	22	-6.10	01.12	70.46.00	RANKING
1	76	38	-6.10	01.14	70.43.00	RANKING
1	77	32	-6.09	01.15	70.45.00	RANKING
1	78	88	-6.08	01.16	70.37.00	RANKING
1	79	29	-6.06	01.18	70.36.00	RANKING
1	80	39	-6.06	01.19	71.17.00	RANKING
1	81	97	-6.05	01.21	70.39.00	RANKING
1	82	37	-6.00	0,094444	71.11.00	RANKING
1	83	79	-5.96	0,093056	71.08.00	RANKING
1	84	25	-5.85	0,095139	71.12.00	RANKING
1	85	94	-5.77	0,084722	69.76	RANKING
2	1	69	-6.10	00.00	70.51.00	RANKING
2	2	41	-6.10	00.18	70.59.00	RANKING
2	3	16	-6.09	00.17	70.56.00	RANKING
2	4	13	-6.08	00.22	70.56.00	RANKING
2	5	58	-6.08	00.13	70.53.00	RANKING
2	6	49	-6.08	00.16	70.56.00	RANKING
2	7	35	-6.08	00.21	70.55.00	RANKING
2	8	60	-6.07	00.14	70.48.00	RANKING
2	9	96	-6.05	00.18	70.57.00	RANKING
2	10	57	-6.02	00.23	70.57.00	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
2	11	90	-6.02	00.19	70.52.00	RANKING
2	12	7	-6.02	00.26	70.60	RANKING
2	13	9	-6.01	0,049306	70.67	RANKING
2	14	66	-5.98	00.42	70.52.00	RANKING
2	15	40	-5.79	0,100694	69.57.00	RANKING
1	2	52	-6.81	00.07	70.42.00	RANKING

4. 5T4B Rhamnocitrin

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	4	-7.41	00.00	70.44.00	RANKING
1	2	22	-7.41	00.08	70.46.00	RANKING
1	3	78	-7.40	00.19	70.48.00	RANKING
1	4	25	-7.40	00.18	70.45.00	RANKING
1	5	29	-7.40	00.05	70.45.00	RANKING
1	6	71	-7.40	00.19	70.50.00	RANKING
1	7	45	-7.40	00.08	70.46.00	RANKING
1	8	89	-7.39	00.07	70.47.00	RANKING
1	9	79	-7.38	00.11	70.43.00	RANKING
1	10	100	-7.37	00.25	70.52.00	RANKING
1	11	52	-7.37	00.21	70.57.00	RANKING
1	12	2	-7.36	00.18	70.38.00	RANKING
1	13	68	-7.35	00.15	70.38.00	RANKING
1	14	32	-7.34	00.23	70.58.00	RANKING
1	15	88	-6.93	00.28	70.51.00	RANKING
1	16	17	-6.93	00.37	70.53.00	RANKING
1	17	91	-6.93	00.32	70.55.00	RANKING
1	18	84	-6.92	00.35	70.54.00	RANKING
1	19	35	-6.91	00.35	70.60	RANKING
1	20	93	-6.90	00.29	70.53.00	RANKING
1	21	7	-6.90	00.31	70.57.00	RANKING
1	22	38	-6.88	0,041667	70.48.00	RANKING
1	23	46	-6.87	00.37	70.60	RANKING
1	24	99	-6.87	00.39	70.61	RANKING
1	25	72	-6.87	0,047917	70.47.00	RANKING
1	26	82	-6.86	00.36	70.55.00	RANKING
1	27	39	-6.86	0,064583	70.40.00	RANKING
1	28	62	-6.85	00.57	70.54.00	RANKING
1	29	20	-6.85	00.29	70.51.00	RANKING
1	30	44	-6.85	00.29	70.50.00	RANKING
1	31	66	-6.85	00.43	70.63	RANKING
1	32	34	-6.84	0,063889	70.40.00	RANKING
1	33	74	-6.84	00.29	70.50.00	RANKING
1	34	43	-6.84	01.02	70.44.00	RANKING
1	35	70	-6.83	00.30	70.53.00	RANKING
1	36	14	-6.83	01.08	70.32.00	RANKING
1	37	37	-6.83	00.31	70.53.00	RANKING
1	38	30	-6.83	01.07	70.33.00	RANKING
1	39	90	-6.83	01.00	70.39.00	RANKING
1	40	65	-6.82	00.31	70.55.00	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	41	60	-6.82	00.32	70.47.00	RANKING
1	42	51	-6.82	00.40	70.60	RANKING
1	43	40	-6.82	00.31	70.45.00	RANKING
1	44	23	-6.82	01.12	70.31.00	RANKING
1	45	81	-6.81	01.00	70.40.00	RANKING
1	46	15	-6.81	01.10	70.37.00	RANKING
1	47	54	-6.81	01.12	70.34.00	RANKING
1	48	56	-6.81	0,065972	70.36.00	RANKING
1	49	67	-6.80	0,067361	70.39.00	RANKING
1	50	41	-6.78	01.08	70.41.00	RANKING
1	51	63	-6.78	00.34	70.56.00	RANKING
1	52	59	-6.78	01.06	70.40.00	RANKING
1	53	24	-6.78	01.17	70.31.00	RANKING
1	54	11	-6.78	01.06	70.40.00	RANKING
1	55	36	-6.77	01.19	70.32.00	RANKING
1	56	53	-6.77	00.35	70.56.00	RANKING
1	57	69	-6.76	01.15	70.37.00	RANKING
1	58	94	-6.75	0,068056	70.44.00	RANKING
1	59	92	-6.75	00.36	70.45.00	RANKING
1	60	85	-6.75	01.13	70.37.00	RANKING
1	61	75	-6.74	00.33	70.54.00	RANKING
1	62	47	-6.74	01.06	70.36.00	RANKING
1	63	26	-6.74	0,093056	71.18.00	RANKING
1	64	55	-6.73	0,091667	71.15.00	RANKING
1	65	9	-6.73	0,093056	71.17.00	RANKING
1	66	33	-6.73	01.21	70.31.00	RANKING
1	67	86	-6.72	0,092361	71.15.00	RANKING
1	68	57	-6.71	00.44	70.58.00	RANKING
1	69	13	-6.71	0,09375	71.16.00	RANKING
1	70	6	-6.71	0,093056	71.17.00	RANKING
1	71	77	-6.71	0,089583	71.12.00	RANKING
1	72	97	-6.70	0,095139	71.17.00	RANKING
1	73	12	-6.70	0,095139	71.16.00	RANKING
1	74	5	-6.70	0,095139	71.20.00	RANKING
1	75	19	-6.70	0,090278	71.13.00	RANKING
1	76	50	-6.69	0,094444	71.17.00	RANKING
1	77	58	-6.69	0,088889	71.13.00	RANKING
1	78	64	-6.69	0,089583	71.12.00	RANKING
1	79	96	-6.68	0,09375	71.17.00	RANKING
1	80	49	-6.68	0,095139	71.19.00	RANKING
1	81	83	-6.68	0,092361	71.14.00	RANKING
1	82	10	-6.68	0,090972	71.14.00	RANKING
1	83	3	-6.67	0,090278	71.12.00	RANKING
1	84	31	-6.67	0,09375	71.18.00	RANKING
1	85	42	-6.67	0,089583	71.14.00	RANKING
1	86	61	-6.66	0,086806	71.09.00	RANKING
1	87	87	-6.65	0,09375	71.17.00	RANKING
1	88	28	-6.64	0,092361	71.15.00	RANKING
1	89	80	-6.62	0,093056	71.15.00	RANKING
1	90	1	-6.61	0,095833	71.17.00	RANKING
1	91	98	-6.60	0,090278	71.12.00	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	92	73	-6.60	0,088889	71.12.00	RANKING
1	93	27	-6.55	0,090972	71.15.00	RANKING
1	94	16	-6.55	0,092361	71.16.00	RANKING
1	95	21	-6.55	0,090278	71.14.00	RANKING
1	96	48	-6.54	0,088889	71.14.00	RANKING
1	97	76	-6.54	0,090972	71.13.00	RANKING
1	98	95	-6.52	0,090972	71.13.00	RANKING
1	99	8	-6.50	0,090972	71.13.00	RANKING
1	100	18	-6.49	0,089583	71.12.00	RANKING

5. 5T4B Rhamnetin

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	100	-7.93	00.00	71.08.00	RANKING
1	2	41	-7.79	00.21	71.10.00	RANKING
1	3	20	-7.55	00.37	70.99	RANKING
1	4	36	-7.54	00.34	71.01.00	RANKING
1	5	89	-7.54	00.36	70.97	RANKING
1	6	18	-7.54	00.38	70.99	RANKING
1	7	31	-7.54	00.34	71.02.00	RANKING
1	8	65	-7.53	00.36	70.98	RANKING
1	9	23	-7.53	00.36	70.96	RANKING
1	10	5	-7.53	00.35	71.00.00	RANKING
1	11	58	-7.53	00.34	71.01.00	RANKING
1	12	82	-7.53	00.35	70.99	RANKING
1	13	74	-7.53	00.39	71.00.00	RANKING
1	14	2	-7.53	00.32	71.03.00	RANKING
1	15	68	-7.53	00.35	71.00.00	RANKING
1	16	32	-7.53	00.38	70.97	RANKING
1	17	85	-7.53	00.35	71.01.00	RANKING
1	18	87	-7.53	00.38	70.97	RANKING
1	19	84	-7.53	00.38	70.99	RANKING
1	20	17	-7.52	00.36	70.98	RANKING
1	21	90	-7.52	00.37	70.98	RANKING
1	22	64	-7.52	00.32	71.04.00	RANKING
1	23	24	-7.52	00.40	71.00.00	RANKING
1	24	30	-7.52	00.38	70.98	RANKING
1	25	70	-7.51	00.34	71.02.00	RANKING
1	26	99	-7.51	00.37	70.99	RANKING
1	27	91	-7.51	00.35	71.01.00	RANKING
1	28	34	-7.50	00.37	70.98	RANKING
1	29	46	-7.50	00.42	71.02.00	RANKING
1	30	86	-7.50	00.47	70.99	RANKING
1	31	7	-7.50	00.33	71.04.00	RANKING
1	32	44	-7.50	00.35	71.01.00	RANKING
1	33	60	-7.50	00.37	70.97	RANKING
1	34	42	-7.50	00.37	70.95	RANKING
1	35	3	-7.49	00.33	71.04.00	RANKING
1	36	28	-7.49	00.37	70.97	RANKING
1	37	59	-7.49	00.37	70.96	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	38	48	-7.49	00.32	71.03.00	RANKING
1	39	62	-7.49	00.36	71.02.00	RANKING
1	40	9	-7.49	00.32	71.04.00	RANKING
1	41	93	-7.48	00.41	71.00.00	RANKING
1	42	69	-7.48	00.33	71.04.00	RANKING
1	43	45	-7.47	00.32	71.06.00	RANKING
1	44	97	-7.47	00.36	71.03.00	RANKING
1	45	14	-7.47	00.39	71.00.00	RANKING
1	46	26	-7.45	00.33	71.05.00	RANKING
1	47	21	-7.44	00.34	71.04.00	RANKING
1	48	6	-7.44	00.34	71.05.00	RANKING
1	49	61	-7.44	00.37	71.05.00	RANKING
1	50	54	-7.43	00.42	71.01.00	RANKING
1	51	73	-7.41	00.36	71.05.00	RANKING
1	52	4	-7.38	00.39	71.04.00	RANKING
1	53	81	-7.38	00.35	71.04.00	RANKING
1	54	96	-7.27	00.41	71.03.00	RANKING
1	55	53	-7.27	00.46	71.02.00	RANKING
1	56	95	-7.26	00.43	71.04.00	RANKING
1	57	38	-7.22	00.39	71.02.00	RANKING
1	58	83	-7.15	00.52	71.03.00	RANKING
2	1	35	-7.03	00.00	71.02.00	RANKING
2	2	13	-7.03	00.16	71.06.00	RANKING
2	3	29	-7.03	00.09	71.04.00	RANKING
2	4	88	-7.01	00.06	71.06.00	RANKING
2	5	56	-7.01	00.10	71.03.00	RANKING
2	6	79	-7.01	00.08	71.05.00	RANKING
2	7	39	-7.01	00.18	71.04.00	RANKING
2	8	25	-7.00	00.16	71.07.00	RANKING
2	9	71	-6.99	00.09	71.02.00	RANKING
2	10	16	-6.99	00.11	71.01.00	RANKING
2	11	76	-6.96	00.11	71.04.00	RANKING
2	12	19	-6.93	00.14	70.98	RANKING
3	1	11	-6.52	00.00	70.07.00	RANKING
3	2	43	-6.42	00.11	70.09.00	RANKING
4	1	8	-6.29	00.00	71.54.00	RANKING
4	2	72	-6.28	00.04	71.55.00	RANKING
4	3	98	-6.27	00.05	71.54.00	RANKING
4	4	77	-6.26	00.06	71.54.00	RANKING
4	5	67	-6.26	00.05	71.54.00	RANKING
4	6	37	-6.26	00.09	71.54.00	RANKING
4	7	55	-6.26	00.09	71.54.00	RANKING
4	8	94	-6.25	00.10	71.55.00	RANKING
4	9	33	-6.19	00.18	71.49.00	RANKING
4	10	47	-6.19	00.20	71.54.00	RANKING
4	11	52	-6.16	00.11	71.52.00	RANKING
4	12	40	-6.06	01.20	71.44.00	RANKING
4	13	66	-6.04	01.22	71.45.00	RANKING
4	14	50	-5.99	0,054861	71.50.00	RANKING
4	15	63	-5.98	0,054167	71.55.00	RANKING
4	16	1	-5.97	0,048611	71.63	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
4	17	49	-5.96	00.43	71.37.00	RANKING
4	18	75	-5.96	00.43	71.37.00	RANKING
4	19	10	-5.96	0,054167	71.48.00	RANKING
4	20	22	-5.95	0,054167	71.56.00	RANKING
4	21	27	-5.95	00.44	71.37.00	RANKING
4	22	12	-5.95	0,053472	71.49.00	RANKING
4	23	78	-5.93	0,059722	71.35.00	RANKING
4	24	80	-5.92	0,053472	71.46.00	RANKING
5	1	51	-6.11	00.00	70.60	RANKING
6	1	15	-6.09	00.00	70.87	RANKING
6	2	57	-6.03	00.19	70.80	RANKING
6	3	92	-6.00	00.19	70.79	RANKING

6. 5T4B 5-Methoxytryptamine

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	74	-7.58	00.00	72.64	RANKING
1	2	70	-7.52	00.32	72.54.00	RANKING
1	3	89	-7.45	0,057639	72.92	RANKING
1	4	81	-7.45	00.42	72.50.00	RANKING
1	5	87	-7.42	01.34	72.25.00	RANKING
1	6	54	-7.39	01.35	72.23.00	RANKING
1	7	7	-7.38	01.31	72.21.00	RANKING
1	8	78	-7.38	01.56	72.09.00	RANKING
1	9	65	-7.37	01.50	72.15.00	RANKING
1	10	75	-7.37	01.39	72.23.00	RANKING
1	11	8	-7.36	01.43	72.15.00	RANKING
1	12	86	-7.36	01.13	72.62	RANKING
1	13	84	-7.36	01.21	72.59.00	RANKING
1	14	46	-7.36	0,056944	72.82	RANKING
1	15	69	-7.36	00.36	72.50.00	RANKING
1	16	72	-7.35	01.40	72.29.00	RANKING
1	17	44	-7.35	00.36	72.55.00	RANKING
1	18	24	-7.34	0,066667	72.91	RANKING
1	19	11	-7.33	01.12	72.40.00	RANKING
1	20	53	-7.33	0,061806	72.77	RANKING
1	21	18	-7.33	01.17	72.57.00	RANKING
1	22	5	-7.32	0,063889	72.75	RANKING
1	23	33	-7.31	01.16	72.65	RANKING
1	24	49	-7.30	0,064583	72.77	RANKING
1	25	59	-7.30	01.05	72.62	RANKING
1	26	83	-7.29	0,061806	72.84	RANKING
1	27	1	-7.28	01.12	72.57.00	RANKING
1	28	85	-7.27	01.06	72.60	RANKING
1	29	99	-7.27	01.32	72.25.00	RANKING
1	30	97	-7.27	0,060417	72.71	RANKING
1	31	19	-7.27	01.32	72.50.00	RANKING
1	32	2	-7.26	01.10	72.53.00	RANKING
1	33	35	-7.26	0,05	72.40.00	RANKING
1	34	29	-7.24	01.18	72.53.00	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	35	9	-7.24	01.44	72.15.00	RANKING
1	36	27	-7.24	01.45	72.18.00	RANKING
1	37	12	-7.23	0,060417	72.72	RANKING
1	38	94	-7.23	01.53	72.10.00	RANKING
1	39	13	-7.23	01.29	72.39.00	RANKING
1	40	39	-7.20	01.59	72.01.00	RANKING
1	41	28	-7.16	01.19	72.48.00	RANKING
1	42	42	-7.14	01.50	72.31.00	RANKING
1	43	38	-7.14	0,054861	72.75	RANKING
1	44	20	-7.13	0,063889	72.78	RANKING
1	45	55	-7.05	01.48	72.31.00	RANKING
1	46	51	-7.04	0,09375	72.16.00	RANKING
1	47	14	-7.03	0,084028	72.29.00	RANKING
1	48	76	-7.01	01.48	72.16.00	RANKING
1	49	58	-7.00	00.28	72.51.00	RANKING
1	50	30	-6.94	0,1	72.32.00	RANKING
1	51	23	-6.88	0,091667	72.02.00	RANKING
1	52	67	-6.88	0,089583	72.08.00	RANKING
1	53	73	-6.83	0,084028	72.16.00	RANKING
1	54	41	-6.82	01.56	72.21.00	RANKING
1	55	98	-6.79	0,094444	71.99	RANKING
1	56	10	-6.73	01.54	72.72	RANKING
1	57	91	-6.69	0,084722	72.29.00	RANKING
1	58	60	-6.69	0,095139	71.99	RANKING
1	59	61	-6.68	0,094444	72.14.00	RANKING
1	60	36	-6.67	01.48	72.13.00	RANKING
1	61	79	-6.66	0,096528	71.92	RANKING
1	62	40	-6.63	01.57	72.69	RANKING
1	63	71	-6.60	0,106944	71.95	RANKING
1	64	80	-6.57	0,109028	72.06.00	RANKING
2	1	100	-6.90	00.00	72.22.00	RANKING
2	2	62	-6.75	00.21	72.15.00	RANKING
2	3	16	-6.62	0,101389	72.21.00	RANKING
2	4	50	-6.52	0,097917	72.23.00	RANKING
2	5	22	-6.45	0,044444	72.28.00	RANKING
2	6	52	-6.41	00.50	72.29.00	RANKING
2	7	82	-6.30	0,04375	72.21.00	RANKING
2	8	34	-6.25	00.54	72.35.00	RANKING
3	1	63	-6.86	00.00	71.15.00	RANKING
3	2	26	-6.82	0,067361	71.32.00	RANKING
3	3	45	-6.81	00.16	71.05.00	RANKING
3	4	95	-6.80	0,108333	72.23.00	RANKING
3	5	3	-6.80	00.47	71.36.00	RANKING
3	6	90	-6.76	01.01	71.40.00	RANKING
3	7	77	-6.70	00.33	71.23.00	RANKING
3	8	93	-6.64	0,102083	72.10.00	RANKING
3	9	57	-6.64	0,041667	71.19.00	RANKING
3	10	64	-6.63	0,104167	72.16.00	RANKING
3	11	32	-6.59	0,104167	72.13.00	RANKING
3	12	21	-6.58	0,041667	71.03.00	RANKING
3	13	56	-6.57	00.57	71.06.00	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
3	14	96	-6.52	0,104861	72.13.00	RANKING
3	15	68	-6.48	01.24	71.75	RANKING
3	16	6	-6.46	0,099306	71.93	RANKING
3	17	15	-6.46	0,110417	71.97	RANKING
3	18	4	-6.45	01.08	71.33.00	RANKING
3	19	88	-6.40	01.27	71.73	RANKING
3	20	17	-6.31	0,066667	71.62	RANKING
3	21	48	-6.30	01.23	71.25.00	RANKING
3	22	92	-6.25	01.21	71.13.00	RANKING
3	23	43	-6.03	0,095833	71.82	RANKING
4	1	37	-6.63	00.00	72.09.00	RANKING
4	2	47	-6.61	00.22	72.01.00	RANKING
4	3	31	-6.58	0,059722	72.39.00	RANKING
4	4	66	-6.27	0,095833	70.96	RANKING
4	5	25	-6.16	0,093056	72.84	RANKING

7. 5T4B 2 sitagliptin

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	83	-7.56	00.00	70.66	RANKING
1	2	92	-7.50	00.49	70.74	RANKING
1	3	97	-7.50	00.50	70.75	RANKING
1	4	24	-7.50	00.48	70.74	RANKING
1	5	50	-7.49	00.49	70.74	RANKING
1	6	80	-7.49	00.50	70.75	RANKING
1	7	72	-7.49	00.48	70.73	RANKING
1	8	61	-7.49	00.50	70.75	RANKING
1	9	55	-7.49	00.48	70.74	RANKING
1	10	90	-7.49	00.51	70.74	RANKING
1	11	43	-7.49	00.50	70.75	RANKING
1	12	76	-7.49	00.49	70.74	RANKING
1	13	11	-7.49	00.49	70.74	RANKING
1	14	10	-7.49	00.48	70.74	RANKING
1	15	62	-7.49	00.50	70.74	RANKING
1	16	14	-7.49	00.49	70.74	RANKING
1	17	3	-7.49	00.47	70.74	RANKING
1	18	12	-7.49	00.52	70.74	RANKING
1	19	25	-7.49	00.48	70.73	RANKING
1	20	36	-7.49	00.48	70.74	RANKING
1	21	96	-7.49	00.50	70.74	RANKING
1	22	67	-7.49	00.50	70.74	RANKING
1	23	23	-7.49	00.50	70.74	RANKING
1	24	45	-7.49	00.51	70.74	RANKING
1	25	44	-7.49	00.51	70.74	RANKING
1	26	82	-7.48	00.48	70.74	RANKING
1	27	85	-7.48	00.52	70.75	RANKING
1	28	87	-7.48	00.48	70.73	RANKING
1	29	63	-7.48	00.50	70.73	RANKING
1	30	27	-7.48	00.50	70.74	RANKING
1	31	5	-7.48	00.52	70.74	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	32	17	-7.48	00.51	70.74	RANKING
1	33	41	-7.48	00.50	70.76	RANKING
1	34	42	-7.48	00.48	70.74	RANKING
1	35	81	-7.48	00.51	70.74	RANKING
1	36	47	-7.48	00.48	70.73	RANKING
1	37	84	-7.48	00.52	70.73	RANKING
1	38	64	-7.48	00.50	70.75	RANKING
1	39	39	-7.48	00.49	70.73	RANKING
1	40	46	-7.48	00.52	70.74	RANKING
1	41	78	-7.47	00.52	70.73	RANKING
1	42	13	-7.47	00.47	70.73	RANKING
1	43	8	-7.47	00.50	70.73	RANKING
1	44	56	-7.47	00.45	70.72	RANKING
1	45	37	-7.47	00.52	70.74	RANKING
1	46	28	-7.47	00.51	70.74	RANKING
1	47	74	-7.47	00.54	70.74	RANKING
1	48	88	-7.47	00.47	70.72	RANKING
1	49	73	-7.47	00.49	70.73	RANKING
1	50	91	-7.47	00.49	70.72	RANKING
1	51	48	-7.47	00.51	70.73	RANKING
1	52	34	-7.47	00.48	70.72	RANKING
1	53	54	-7.46	00.55	70.74	RANKING
1	54	26	-7.46	00.48	70.73	RANKING
1	55	94	-7.46	00.56	70.74	RANKING
1	56	58	-7.46	00.50	70.73	RANKING
1	57	31	-7.46	00.54	70.75	RANKING
1	58	75	-7.46	00.45	70.71	RANKING
1	59	18	-7.45	00.50	70.72	RANKING
1	60	59	-7.44	00.57	70.73	RANKING
1	61	66	-7.34	00.43	70.70	RANKING
1	62	19	-7.29	0,094444	71.09.00	RANKING
1	63	15	-7.29	0,095139	71.06.00	RANKING
1	64	1	-7.29	0,095139	71.04.00	RANKING
1	65	20	-7.28	0,094444	71.08.00	RANKING
1	66	60	-7.28	0,095139	71.04.00	RANKING
1	67	53	-7.28	0,095139	71.04.00	RANKING
1	68	16	-7.28	0,095139	71.09.00	RANKING
1	69	33	-7.28	0,095139	71.07.00	RANKING
1	70	35	-7.28	0,095139	71.06.00	RANKING
1	71	77	-7.28	0,094444	71.09.00	RANKING
1	72	69	-7.28	0,095139	71.09.00	RANKING
1	73	98	-7.28	0,095139	71.03.00	RANKING
1	74	49	-7.28	0,095833	71.09.00	RANKING
1	75	99	-7.28	0,095139	71.06.00	RANKING
1	76	9	-7.28	0,094444	71.03.00	RANKING
1	77	70	-7.28	0,095139	71.04.00	RANKING
1	78	32	-7.28	0,094444	71.09.00	RANKING
1	79	6	-7.28	0,09375	71.07.00	RANKING
1	80	38	-7.28	0,095833	71.10.00	RANKING
1	81	52	-7.27	0,09375	71.08.00	RANKING
1	82	79	-7.27	0,094444	71.04.00	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	83	40	-7.27	0,095139	71.04.00	RANKING
1	84	71	-7.27	0,09375	71.06.00	RANKING
1	85	29	-7.27	0,094444	71.04.00	RANKING
1	86	89	-7.27	0,095139	71.04.00	RANKING
1	87	57	-7.27	0,093056	71.07.00	RANKING
1	88	86	-7.27	0,094444	71.04.00	RANKING
1	89	30	-7.27	0,095139	71.05.00	RANKING
1	90	68	-7.27	0,09375	71.04.00	RANKING
1	91	22	-7.27	0,095139	71.04.00	RANKING
1	92	95	-7.27	0,093056	71.09.00	RANKING
1	93	7	-7.26	0,096528	71.09.00	RANKING
1	94	93	-7.26	0,095833	71.08.00	RANKING
1	95	2	-7.26	0,092361	71.04.00	RANKING
1	96	65	-7.26	0,094444	71.08.00	RANKING
1	97	4	-7.26	0,093056	71.03.00	RANKING
1	98	100	-7.26	0,09375	71.04.00	RANKING
1	99	21	-7.25	0,092361	71.06.00	RANKING
1	100	51	-7.25	0,090278	71.05.00	RANKING

8. 5Y2O 2-Heptanone

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	57	-4.26	0.00	92.16	RANKING
1	2	68	-4.25	0.17	92.25	RANKING
1	3	94	-4.24	0.36	92.24	RANKING
1	4	8	-4.24	0.47	92.31	RANKING
1	5	25	-4.23	0.29	92.32	RANKING
1	6	39	-4.22	0.48	92.38	RANKING
1	7	46	-4.22	0.52	92.25	RANKING
1	8	36	-4.21	1.16	93.00	RANKING
1	9	86	-4.21	0.25	92.24	RANKING
1	10	90	-4.20	1.10	92.96	RANKING
1	11	40	-4.20	0.38	92.30	RANKING
1	12	30	-4.20	0.54	92.44	RANKING
1	13	84	-4.20	0.45	92.31	RANKING
1	14	19	-4.20	0.26	92.26	RANKING
1	15	78	-4.20	0.52	92.30	RANKING
1	16	85	-4.19	0.41	92.26	RANKING
1	17	37	-4.18	0.49	92.39	RANKING
1	18	88	-4.18	0.53	92.41	RANKING
1	19	67	-4.18	1.12	92.93	RANKING
1	20	100	-4.17	0.93	92.76	RANKING
1	21	62	-4.17	0.88	92.75	RANKING
1	22	24	-4.17	0.97	92.74	RANKING
1	23	26	-4.16	0.61	92.35	RANKING
1	24	58	-4.16	0.94	92.75	RANKING
1	25	9	-4.16	0.60	92.45	RANKING
1	26	96	-4.16	0.55	92.46	RANKING
1	27	33	-4.15	1.02	92.77	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	28	20	-4.15	0.63	92.41	RANKING
1	29	4	-4.15	1.05	92.71	RANKING
1	30	98	-4.15	0.52	92.39	RANKING
1	31	2	-4.15	0.85	92.15	RANKING
1	32	14	-4.15	1.07	92.78	RANKING
1	33	23	-4.14	0.57	92.34	RANKING
1	34	87	-4.14	0.71	92.33	RANKING
1	35	6	-4.14	0.66	92.41	RANKING
1	36	38	-4.14	0.60	92.44	RANKING
1	37	45	-4.13	0.72	92.31	RANKING
1	38	29	-4.13	0.70	92.64	RANKING
1	39	69	-4.13	1.15	92.51	RANKING
1	40	59	-4.13	0.72	92.44	RANKING
1	41	77	-4.13	1.07	92.57	RANKING
1	42	49	-4.13	0.95	92.77	RANKING
1	43	10	-4.13	0.89	92.63	RANKING
1	44	66	-4.13	0.59	92.45	RANKING
1	45	91	-4.12	0.73	92.60	RANKING
1	46	13	-4.12	0.67	92.40	RANKING
1	47	16	-4.12	0.67	92.39	RANKING
1	48	28	-4.12	0.55	92.30	RANKING
1	49	35	-4.12	0.93	92.77	RANKING
1	50	93	-4.12	0.90	92.12	RANKING
1	51	32	-4.11	0.60	92.38	RANKING
1	52	43	-4.11	0.75	92.43	RANKING
1	53	15	-4.11	1.24	92.54	RANKING
1	54	5	-4.11	0.93	92.78	RANKING
1	55	41	-4.11	0.63	92.35	RANKING
1	56	81	-4.11	1.01	92.39	RANKING
1	57	89	-4.10	0.61	92.47	RANKING
1	58	42	-4.10	0.56	92.37	RANKING
1	59	34	-4.10	0.59	92.42	RANKING
1	60	51	-4.10	0.65	92.41	RANKING
1	61	76	-4.10	0.74	92.47	RANKING
1	62	61	-4.09	0.60	92.45	RANKING
1	63	55	-4.09	0.60	92.36	RANKING
1	64	22	-4.09	0.66	92.22	RANKING
1	65	72	-4.09	0.74	92.68	RANKING
1	66	73	-4.09	1.28	92.86	RANKING
1	67	64	-4.09	0.64	92.21	RANKING
1	68	95	-4.08	0.68	92.57	RANKING
1	69	99	-4.08	0.94	91.95	RANKING
1	70	48	-4.08	0.90	92.12	RANKING
1	71	65	-4.08	1.04	92.79	RANKING
1	72	52	-4.07	0.68	92.42	RANKING
1	73	18	-4.07	0.74	92.48	RANKING
1	74	1	-4.07	1.07	92.78	RANKING
1	75	80	-4.07	0.88	92.34	RANKING
1	76	53	-4.07	0.88	92.31	RANKING
1	77	3	-4.06	0.78	92.59	RANKING
1	78	71	-4.06	0.75	92.38	RANKING
1	79	63	-4.06	1.07	92.65	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	80	60	-4.06	0.83	92.38	RANKING
1	81	70	-4.05	0.89	92.25	RANKING
1	82	74	-4.05	0.89	91.99	RANKING
1	83	12	-4.05	0.95	92.36	RANKING
1	84	11	-4.05	1.17	92.88	RANKING
1	85	82	-4.04	1.01	92.34	RANKING
1	86	97	-4.04	1.02	92.84	RANKING
1	87	31	-4.04	1.45	93.01	RANKING
1	88	44	-4.04	0.97	92.12	RANKING
1	89	50	-4.04	0.84	92.42	RANKING
1	90	17	-4.03	1.01	92.71	RANKING
1	91	21	-4.03	0.98	92.41	RANKING
1	92	75	-4.03	0.80	92.46	RANKING
1	93	27	-4.03	1.56	93.05	RANKING
1	94	79	-4.03	1.54	93.08	RANKING
1	95	83	-4.03	0.95	92.70	RANKING
1	96	56	-4.03	0.95	92.73	RANKING
1	97	54	-4.02	1.00	92.75	RANKING
1	98	92	-4.00	1.49	92.95	RANKING
1	99	47	-3.99	0.66	92.48	RANKING
1	100	7	-3.90	1.11	92.63	RANKING

9. 5Y2O 5-Hydroxytryptamine

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	62	-6.11	0.00	92.67	RANKING
1	2	80	-6.08	0.11	92.64	RANKING
1	3	37	-6.06	0.16	92.61	RANKING
1	4	55	-6.03	0.20	92.78	RANKING
1	5	56	-6.00	0.20	92.68	RANKING
1	6	8	-5.90	0.28	92.63	RANKING
1	7	63	-5.82	0.34	92.64	RANKING
1	8	43	-5.80	0.36	92.61	RANKING
1	9	20		-5.77	0.38	92.66
1	10	36	-5.76	0.39	92.68	RANKING
1	11	2	-5.59	0.39	92.72	RANKING
1	12	96	-5.39	0.42	92.63	RANKING
2	1	95	-5.48	0.00	92.58	RANKING
2	2	83	-5.47	0.12	92.66	RANKING
2	3	92	-5.47	0.58	92.40	RANKING
2	4	73	-5.47	0.97	92.65	RANKING
2	5	22	-5.46	0.57	92.44	RANKING
2	6	65	-5.46	0.57	92.56	RANKING
2	7	41	-5.46	0.96	92.63	RANKING
2	8	12	-5.46	0.96	92.68	RANKING
2	9	98	-5.45	0.56	92.42	RANKING
2	10	4	-5.45	0.97	92.65	RANKING
2	11	33	-5.45	0.17	92.53	RANKING
2	12	48	-5.45	0.97	92.67	RANKING
2	13	25	-5.45	0.57	92.45	RANKING
2	14	93	-5.45	0.74	92.37	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
2	15	3	-5.44	0.54	92.46	RANKING
2	16	21	-5.44	0.97	92.65	RANKING
2	17	19	-5.44	0.56	92.47	RANKING
2	18	99	-5.44	0.60	92.36	RANKING
2	19	16	-5.43	0.99	92.68	RANKING
2	20	76	-5.43	0.26	92.52	RANKING
2	21	28	-5.43	0.20	92.63	RANKING
2	22	52	-5.43	0.97	92.61	RANKING
2	23	49	-5.43	0.97	92.57	RANKING
2	24	59	-5.43	0.99	92.61	RANKING
2	25	10	-5.43	0.23	92.67	RANKING
2	26	39	-5.43	0.59	92.48	RANKING
2	27	60	-5.43	0.55	92.43	RANKING
2	28	57	-5.43	0.63	92.27	RANKING
2	29	34	-5.43	1.01	92.60	RANKING
2	30	53	-5.42	0.29	92.51	RANKING
2	31	88	-5.42	0.99	92.66	RANKING
2	32	72	-5.42	1.02	92.57	RANKING
2	33	74	-5.42	0.98	92.71	RANKING
2	34	58	-5.42	0.39	92.66	RANKING
2	35	70	-5.42	1.01	92.67	RANKING
2	36	7	-5.42	1.00	92.64	RANKING
2	37	45	-5.41	0.97	92.62	RANKING
2	38	67	-5.41	0.98	92.55	RANKING
2	39	24	-5.41	1.01	92.64	RANKING
2	40	29	-5.41	1.01	92.68	RANKING
2	41	42	-5.40	0.97	92.68	RANKING
2	42	17	-5.40	0.56	92.36	RANKING
2	43	89	-5.40	0.95	92.57	RANKING
2	44	66	-5.40	0.30	92.64	RANKING
2	45	94	-5.39	1.01	92.67	RANKING
2	46	9	-5.39	0.55	92.55	RANKING
2	47	50	-5.39	0.94	92.63	RANKING
2	48	13	-5.39	1.00	92.53	RANKING
2	49	79	-5.38	0.43	92.72	RANKING
2	50	27	-5.38	0.98	92.63	RANKING
2	51	86	-5.37	0.96	92.58	RANKING
2	52	77	-5.37	0.95	92.54	RANKING
2	53	14	-5.37	1.01	92.67	RANKING
2	54	47	-5.37	1.00	92.60	RANKING
2	55	87	-5.37	1.01	92.65	RANKING
2	56	11	-5.36	0.96	92.58	RANKING
2	57	35	-5.36	0.96	92.64	RANKING
2	58	69	-5.36	1.01	92.52	RANKING
2	59	15	-5.35	1.06	92.62	RANKING
2	60	40	-5.34	0.97	92.56	RANKING
2	61	91	-5.34	0.97	92.62	RANKING
2	62	51	-5.32	1.01	92.59	RANKING
2	63	97	-5.32	0.95	92.68	RANKING
2	64	75	-5.32	0.49	92.64	RANKING
2	65	68	-5.31	1.00	92.68	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
2	66	38	-5.30	1.21	92.49	RANKING
2	67	82	-5.27	0.69	92.65	RANKING
2	68	26	-5.21	0.46	92.68	RANKING
3	1	23	-5.32	0.00	92.60	RANKING
3	2	81	-5.32	0.06	92.62	RANKING
3	3	61	-5.31	0.02	92.60	RANKING
3	4	5	-5.29	0.50	92.44	RANKING
3	5	44	-5.29	0.03	92.60	RANKING
3	6	1	-5.29	0.12	92.60	RANKING
3	7	54	-5.28	0.37	92.44	RANKING
3	8	84	-5.28	0.04	92.60	RANKING
3	9	90	-5.27	0.14	92.62	RANKING
3	10	100	-5.24	0.14	92.62	RANKING
4	1	71	-4.94	0.00	91.36	RANKING
4	2	18	-4.93	0.12	91.37	RANKING
4	3	31	-4.90	0.20	91.50	RANKING
4	4	78	-4.88	0.25	91.33	RANKING
4	5	30	-4.87	0.17	91.41	RANKING
5	1	64	-4.88	0.00	93.15	RANKING
5	2	32	-4.86	0.18	93.18	RANKING
5	3	46	-4.83	0.35	93.02	RANKING
5	4	6	-4.81	0.30	93.09	RANKING
6	1	85	-4.58	0.00	92.93	RANKING

10. 5Y2O Kaempferol

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	88	-6.57	0.00	91.92	RANKING
1	2	52	-6.57	0.02	91.91	RANKING
1	3	90	-6.57	0.03	91.92	RANKING
1	4	46	-6.57	0.03	91.91	RANKING
1	5	82	-6.57	0.06	91.95	RANKING
1	6	73	-6.56	0.02	91.92	RANKING
1	7	79	-6.56	0.03	91.93	RANKING
1	8	72	-6.56	0.04	91.94	RANKING
1	9	11	-6.56	0.02	91.92	RANKING
1	10	36	-6.56	0.03	91.92	RANKING
1	11	17	-6.56	0.06	91.95	RANKING
1	12	59	-6.56	0.06	91.95	RANKING
1	13	13	-6.56	0.06	91.94	RANKING
1	14	32	-6.56	0.06	91.94	RANKING
1	15	14	-6.56	0.03	91.93	RANKING
1	16	48	-6.56	0.07	91.95	RANKING
1	17	19	-6.56	0.05	91.94	RANKING
1	18	80	-6.56	0.08	91.96	RANKING
1	19	25	-6.56	0.06	91.95	RANKING
1	20	56	-6.56	0.09	91.96	RANKING
1	21	81	-6.56	0.06	91.94	RANKING
1	22	30	-6.56	0.10	91.97	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	23	95	-6.56	0.07	91.95	RANKING
1	24	93	-6.56	0.06	91.95	RANKING
1	25	77	-6.56	0.03	91.91	RANKING
1	26	33	-6.56	0.03	91.92	RANKING
1	27	55	-6.56	0.08	91.96	RANKING
1	28	76	-6.56	0.02	91.92	RANKING
1	29	27	-6.56	0.04	91.93	RANKING
1	30	57	-6.56	0.09	91.96	RANKING
1	31	8	-6.56	0.05	91.93	RANKING
1	32	96	-6.56	0.06	91.94	RANKING
1	33	26	-6.55	0.11	91.97	RANKING
1	34	67	-6.55	0.08	91.95	RANKING
1	35	42	-6.55	0.12	91.98	RANKING
1	36	43	-6.55	0.12	91.97	RANKING
1	37	87	-6.55	0.05	91.94	RANKING
1	38	100	-6.55	0.12	91.97	RANKING
1	39	91	-6.55	0.04	91.91	RANKING
1	40	75	-6.55	0.14	91.98	RANKING
1	41	5	-6.55	0.13	91.98	RANKING
1	42	98	-6.55	0.13	91.98	RANKING
1	43	21	-6.55	0.05	91.91	RANKING
1	44	84	-6.55	0.09	91.96	RANKING
1	45	15	-6.54	0.15	91.99	RANKING
1	46	49	-6.54	0.15	91.99	RANKING
1	47	23	-6.54	0.17	91.99	RANKING
1	48	63	-6.53	0.16	91.99	RANKING
1	49	64	-6.52	0.15	91.98	RANKING
1	50	1	-6.52	0.08	91.93	RANKING
1	51	12	-6.49	0.14	91.94	RANKING
1	52	35	-6.49	0.13	91.93	RANKING
1	53	66	-6.48	0.12	91.93	RANKING
1	54	54	-6.48	0.14	91.94	RANKING
1	55	29	-6.48	0.13	91.93	RANKING
1	56	45	-6.48	0.15	91.93	RANKING
1	57	94	-6.48	0.13	91.93	RANKING
1	58	37	-6.48	0.14	91.94	RANKING
1	59	70	-6.48	0.16	91.93	RANKING
1	60	99	-6.48	0.12	91.93	RANKING
1	61	68	-6.48	0.17	91.93	RANKING
1	62	9	-6.48	0.13	91.93	RANKING
1	63	44	-6.48	0.24	91.96	RANKING
1	64	85	-6.48	0.24	91.96	RANKING
1	65	53	-6.48	0.14	91.95	RANKING
1	66	89	-6.48	0.23	91.95	RANKING
1	67	24	-6.48	0.25	91.96	RANKING
1	68	40	-6.48	0.25	91.97	RANKING
1	69	65	-6.48	0.15	91.94	RANKING
1	70	20	-6.48	0.23	91.96	RANKING
1	71	38	-6.47	0.23	91.96	RANKING
1	72	62	-6.47	0.21	91.95	RANKING
1	73	31	-6.47	0.24	91.96	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	74	92	-6.47	0.16	91.94	RANKING
1	75	39	-6.47	0.23	91.96	RANKING
1	76	60	-6.47	0.12	91.93	RANKING
1	77	28	-6.47	0.23	91.95	RANKING
1	78	58	-6.47	0.25	91.96	RANKING
1	79	86	-6.47	0.26	91.96	RANKING
1	80	83	-6.47	0.22	91.96	RANKING
1	81	50	-6.47	0.24	91.96	RANKING
1	82	4	-6.47	0.17	91.94	RANKING
1	83	71	-6.47	0.16	91.95	RANKING
1	84	2	-6.47	0.23	91.96	RANKING
1	85	74	-6.47	0.23	91.96	RANKING
1	86	41	-6.47	0.13	91.94	RANKING
1	87	61	-6.47	0.25	91.96	RANKING
1	88	16	-6.46	0.13	91.93	RANKING
1	89	69	-6.46	0.13	91.94	RANKING
1	90	18	-6.46	0.25	91.97	RANKING
1	91	47	-6.46	0.23	91.95	RANKING
1	92	51	-6.46	0.25	91.96	RANKING
1	93	6	-6.46	0.21	91.96	RANKING
1	94	34	-6.46	0.16	91.95	RANKING
1	95	22	-6.45	0.25	91.96	RANKING
1	96	7	-6.45	0.28	91.99	RANKING
1	97	3	-6.44	0.35	91.96	RANKING
1	98	78	-6.44	0.13	91.93	RANKING
1	99	10	-6.43	0.30	91.97	RANKING
1	100	97	-6.43	0.26	91.97	RANKING

11. 5Y2O Rhamnocitrin

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	78	-7.19	0.00	91.99	RANKING
1	2	71	-7.18	0.02	91.99	RANKING
1	3	43	-7.18	0.02	91.99	RANKING
1	4	81	-7.18	0.01	91.98	RANKING
1	5	60	-7.18	0.02	91.99	RANKING
1	6	1	-7.18	0.04	92.00	RANKING
1	7	97	-7.18	0.04	92.00	RANKING
1	8	18	-7.18	0.02	91.99	RANKING
1	9	68	-7.18	0.02	91.98	RANKING
1	10	11	-7.18	0.05	92.01	RANKING
1	11	8	-7.18	0.08	92.02	RANKING
1	12	67	-7.18	0.07	92.02	RANKING
1	13	54	-7.18	0.08	92.02	RANKING
1	14	32	-7.18	0.05	92.00	RANKING
1	15	22	-7.18	0.02	91.99	RANKING
1	16	47	-7.18	0.08	92.02	RANKING
1	17	48	-7.18	0.04	92.00	RANKING
1	18	84	-7.18	0.04	92.00	RANKING
1	19	89	-7.18	0.08	92.03	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	20	12	-7.18	0.06	92.01	RANKING
1	21	62	-7.18	0.09	92.03	RANKING
1	22	70	-7.18	0.04	92.00	RANKING
1	23	24	-7.18	0.07	92.02	RANKING
1	24	15	-7.18	0.06	91.99	RANKING
1	25	9	-7.18	0.06	92.02	RANKING
1	26	94	-7.18	0.09	92.02	RANKING
1	27	83	-7.18	0.06	92.00	RANKING
1	28	82	-7.17	0.09	92.03	RANKING
1	29	3	-7.17	0.07	92.02	RANKING
1	30	28	-7.17	0.08	92.03	RANKING
1	31	95	-7.17	0.08	92.01	RANKING
1	32	69	-7.17	0.08	92.00	RANKING
1	33	52	-7.17	0.06	91.98	RANKING
1	34	41	-7.17	0.04	91.98	RANKING
1	35	44	-7.17	0.06	91.97	RANKING
1	36	88	-7.17	0.04	91.98	RANKING
1	37	74	-7.17	0.05	92.00	RANKING
1	38	27	-7.17	0.02	91.99	RANKING
1	39	92	-7.17	0.09	92.03	RANKING
1	40	80	-7.17	0.08	92.00	RANKING
1	41	36	-7.17	0.03	91.97	RANKING
1	42	10	-7.17	0.10	92.03	RANKING
1	43	72	-7.17	0.07	92.02	RANKING
1	44	77	-7.17	0.08	92.03	RANKING
1	45	42	-7.17	0.04	91.97	RANKING
1	46	37	-7.17	0.09	91.99	RANKING
1	47	49	-7.17	0.13	92.04	RANKING
1	48	35	-7.17	0.03	91.99	RANKING
1	49	75	-7.17	0.11	92.04	RANKING
1	50	40	-7.17	0.10	92.04	RANKING
1	51	17	-7.17	0.05	92.00	RANKING
1	52	21	-7.17	0.04	91.98	RANKING
1	53	58	-7.17	0.12	92.05	RANKING
1	54	65	-7.17	0.05	92.00	RANKING
1	55	79	-7.17	0.06	91.98	RANKING
1	56	39	-7.17	0.12	92.04	RANKING
1	57	30	-7.16	0.04	92.00	RANKING
1	58	66	-7.16	0.11	92.02	RANKING
1	59	19	-7.16	0.07	92.00	RANKING
1	60	34	-7.16	0.12	92.02	RANKING
1	61	46	-7.16	0.11	92.04	RANKING
1	62	87	-7.16	0.14	92.05	RANKING
1	63	91	-7.16	0.15	92.05	RANKING
1	64	86	-7.16	0.06	91.99	RANKING
1	65	14	-7.14	0.06	91.99	RANKING
1	66	26	-7.14	0.16	92.06	RANKING
1	67	63	-7.12	0.15	91.99	RANKING
1	68	59	-7.08	0.11	91.99	RANKING
1	69	100	-7.08	0.12	92.00	RANKING
1	70	98	-7.08	0.12	91.99	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	71	38	-7.07	0.12	91.99	RANKING
1	72	50	-7.07	0.12	91.99	RANKING
1	73	5	-7.07	0.12	92.00	RANKING
1	74	2	-7.07	0.14	92.01	RANKING
1	75	6	-7.07	0.12	91.99	RANKING
1	76	23	-7.07	0.12	91.99	RANKING
1	77	31	-7.07	0.12	91.99	RANKING
1	78	64	-7.06	0.16	92.00	RANKING
1	79	76	-7.06	0.12	91.99	RANKING
1	80	51	-7.06	0.14	92.00	RANKING
1	81	25	-7.06	0.17	92.01	RANKING
1	82	33	-7.05	0.14	92.01	RANKING
1	83	85	-7.05	0.19	92.00	RANKING
1	84	61	-7.04	0.22	92.02	RANKING
1	85	13	-7.04	0.22	92.01	RANKING
1	86	16	-7.03	0.15	92.00	RANKING
1	87	45	-7.03	0.23	92.01	RANKING
1	88	29	-7.03	0.15	91.99	RANKING
1	89	57	-7.03	0.15	91.99	RANKING
1	90	7	-7.03	0.25	92.02	RANKING
1	91	99	-7.00	0.25	92.00	RANKING
2	1	96	-6.07	0.00	90.88	RANKING
3	1	56	-5.98	0.00	90.25	RANKING
3	2	90	-5.97	0.05	90.27	RANKING
3	3	4	-5.95	0.10	90.29	RANKING
3	4	20	-5.93	0.42	90.14	RANKING
3	5	73	-5.92	0.54	90.17	RANKING
3	6	55	-5.92	0.54	90.14	RANKING
3	7	53	-5.92	0.69	90.00	RANKING
3	8	93	-5.87	0.39	90.16	RANKING

12. 5Y2O Rhamnetin

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	69	-7.04	0.00	91.72	RANKING
1	2	12	-7.04	0.04	91.72	RANKING
1	3	25	-7.03	0.03	91.72	RANKING
1	4	80	-7.03	0.10	91.72	RANKING
1	5	73	-7.02	0.06	91.74	RANKING
1	6	1	-7.02	0.03	91.71	RANKING
1	7	85	-7.02	0.04	91.73	RANKING
1	8	2	-7.01	0.05	91.71	RANKING
1	9	31	-7.01	0.06	91.74	RANKING
1	10	99	-7.00	0.15	91.71	RANKING
1	11	95	-6.98	0.20	91.76	RANKING
1	12	43	-6.97	0.11	91.74	RANKING
1	13	16	-6.82	0.35	91.80	RANKING
1	14	94	-6.82	0.35	91.81	RANKING
1	15	51	-6.81	0.34	91.81	RANKING
1	16	78	-6.75	0.27	91.82	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
2	1	90	-6.35	0.00	91.09	RANKING
2	2	7	-6.35	0.04	91.09	RANKING
2	3	26	-6.35	0.11	91.04	RANKING
2	4	55	-6.35	0.05	91.10	RANKING
2	5	18	-6.34	0.08	91.10	RANKING
2	6	59	-6.34	0.13	91.02	RANKING
2	7	63	-6.34	0.05	91.11	RANKING
2	8	62	-6.34	0.11	91.11	RANKING
2	9	24	-6.34	0.11	91.12	RANKING
2	10	48	-6.34	0.11	91.05	RANKING
2	11	46	-6.34	0.04	91.09	RANKING
2	12	58	-6.34	0.11	91.12	RANKING
2	13	28	-6.33	0.12	91.11	RANKING
2	14	11	-6.33	0.08	91.06	RANKING
2	15	17	-6.33	0.08	91.08	RANKING
2	16	5	-6.33	0.11	91.10	RANKING
2	17	67	-6.33	0.08	91.09	RANKING
2	18	44	-6.29	0.13	91.17	RANKING
2	19	23	-6.18	1.58	90.39	RANKING
2	20	50	-6.18	1.55	90.46	RANKING
2	21	57	-6.17	1.56	90.42	RANKING
2	22	54	-6.15	1.55	90.39	RANKING
2	23	74	-6.15	1.49	90.53	RANKING
2	24	49	-6.02	1.93	91.46	RANKING
2	25	45	-6.02	1.93	91.47	RANKING
2	26	6	-5.87	1.86	90.22	RANKING
2	27	39	-5.86	1.79	90.35	RANKING
2	28	3	-5.86	1.79	90.34	RANKING
2	29	71	-5.86	1.79	90.35	RANKING
2	30	92	-5.85	1.81	90.31	RANKING
2	31	38	-5.85	1.83	90.17	RANKING
2	32	82	-5.83	1.35	90.63	RANKING
3	1	70	-6.23	0.00	90.36	RANKING
3	2	22	-6.20	0.30	90.46	RANKING
3	3	13	-6.20	0.06	90.34	RANKING
3	4	15	-6.20	0.07	90.35	RANKING
3	5	52	-6.20	0.13	90.38	RANKING
3	6	32	-6.20	0.08	90.34	RANKING
3	7	100	-6.20	0.08	90.35	RANKING
3	8	40	-6.20	0.13	90.30	RANKING
3	9	65	-6.19	0.12	90.39	RANKING
3	10	88	-6.19	0.15	90.39	RANKING
3	11	79	-6.18	0.11	90.34	RANKING
3	12	21	-6.18	0.16	90.29	RANKING
3	13	93	-6.18	0.08	90.35	RANKING
3	14	56	-6.17	0.12	90.35	RANKING
3	15	97	-6.17	0.17	90.37	RANKING
3	16	60	-6.17	0.15	90.37	RANKING
3	17	53	-6.16	0.15	90.31	RANKING
3	18	77	-6.16	0.13	90.32	RANKING
3	19	83	-6.16	0.27	90.24	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
3	20	84	-6.16	0.23	90.27	RANKING
3	21	9	-6.15	0.24	90.24	RANKING
3	22	42	-6.15	0.28	90.22	RANKING
3	23	61	-6.15	0.33	90.21	RANKING
3	24	10	-6.15	0.35	90.22	RANKING
3	25	98	-6.15	0.37	90.22	RANKING
3	26	34	-6.15	0.35	90.22	RANKING
3	27	72	-6.15	0.37	90.20	RANKING
3	28	76	-6.14	0.32	90.25	RANKING
3	29	87	-6.14	0.31	90.24	RANKING
3	30	47	-6.14	0.17	90.36	RANKING
3	31	37	-6.14	0.22	90.37	RANKING
3	32	36	-6.14	0.19	90.31	RANKING
3	33	35	-6.13	0.16	90.37	RANKING
3	34	30	-6.13	0.45	90.17	RANKING
3	35	66	-6.12	0.62	90.18	RANKING
3	36	64	-6.12	0.22	90.37	RANKING
3	37	89	-6.12	0.20	90.37	RANKING
3	38	4	-6.11	0.22	90.29	RANKING
3	39	33	-6.11	0.36	90.40	RANKING
3	40	96	-6.10	0.19	90.32	RANKING
3	41	8	-6.09	0.47	90.18	RANKING
3	42	27	-6.09	0.31	90.25	RANKING
3	43	14	-5.96	0.44	90.29	RANKING
3	44	29	-5.89	1.04	90.02	RANKING
3	45	19	-5.84	1.08	90.03	RANKING
3	46	86	-5.83	1.08	90.05	RANKING
3	47	91	-5.82	1.02	90.04	RANKING
3	48	75	-5.82	1.12	89.96	RANKING
4	1	20	-5.37	0.00	90.44	RANKING
4	2	41	-5.36	0.06	90.44	RANKING
4	3	68	-5.36	0.05	90.45	RANKING
5	1	81	-5.30	0.00	90.79	RANKING

13. 5Y2O 5-Methoxytryptamine

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	92	-5.54	0.00	92.58	RANKING
1	2	29	-5.54	0.02	92.58	RANKING
1	3	98	-5.54	0.07	92.57	RANKING
1	4	31	-5.53	0.09	92.58	RANKING
1	5	54	-5.53	0.05	92.56	RANKING
1	6	15	-5.53	0.06	92.57	RANKING
1	7	28	-5.53	0.06	92.57	RANKING
1	8	35	-5.53	0.04	92.57	RANKING
1	9	32	-5.53	0.14	92.57	RANKING
1	10	11	-5.53	0.21	92.61	RANKING
1	11	37	-5.53	0.07	92.58	RANKING
1	12	81	-5.53	0.07	92.59	RANKING
1	13	8	-5.53	0.11	92.58	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	14	61	-5.53	0.10	92.55	RANKING
1	15	20	-5.52	0.16	92.55	RANKING
1	16	79	-5.52	0.11	92.56	RANKING
1	17	85	-5.52	0.13	92.55	RANKING
1	18	27	-5.52	0.10	92.56	RANKING
1	19	3	-5.52	0.14	92.60	RANKING
1	20	36	-5.51	0.26	92.59	RANKING
1	21	94	-5.51	0.14	92.61	RANKING
1	22	96	-5.50	0.29	92.59	RANKING
1	23	45	-5.50	0.15	92.55	RANKING
1	24	26	-5.50	0.24	92.58	RANKING
1	25	87	-5.50	0.10	92.55	RANKING
1	26	78	-5.50	0.17	92.54	RANKING
1	27	76	-5.49	0.26	92.64	RANKING
1	28	50	-5.49	0.28	92.63	RANKING
1	29	46	-5.49	0.27	92.53	RANKING
1	30	9	-5.48	0.14	92.58	RANKING
1	31	1	-5.48	0.22	92.59	RANKING
1	32	34	-5.47	0.23	92.57	RANKING
1	33	74	-5.46	0.28	92.55	RANKING
1	34	71	-5.46	0.33	92.64	RANKING
1	35	88	-5.41	0.48	92.37	RANKING
1	36	89	-5.11	0.77	92.55	RANKING
2	1	24	-5.21	0.00	92.93	RANKING
2	2	6	-5.20	0.18	92.92	RANKING
2	3	62	-5.16	0.29	92.96	RANKING
2	4	25	-5.14	1.64	92.68	RANKING
2	5	55	-5.13	0.57	92.94	RANKING
2	6	16	-5.08	1.36	92.86	RANKING
2	7	4	-5.07	1.50	92.92	RANKING
2	8	93	-5.06	1.45	92.87	RANKING
2	9	80	-5.06	1.35	92.87	RANKING
2	10	65	-5.06	1.55	92.72	RANKING
2	11	97	-5.06	1.53	92.77	RANKING
2	12	19	-5.05	1.66	92.72	RANKING
2	13	95	-5.05	1.37	93.06	RANKING
2	14	57	-5.04	1.39	92.84	RANKING
2	15	48	-5.03	1.26	92.82	RANKING
2	16	90	-5.03	0.69	92.81	RANKING
2	17	18	-5.03	2.00	92.60	RANKING
2	18	41	-5.03	1.32	92.78	RANKING
2	19	82	-5.01	1.44	92.93	RANKING
2	20	58	-5.00	1.55	92.77	RANKING
2	21	40	-5.00	1.24	93.20	RANKING
2	22	77	-4.98	1.60	93.09	RANKING
2	23	7	-4.97	1.97	93.05	RANKING
2	24	53	-4.93	1.52	93.03	RANKING
2	25	14	-4.87	1.58	92.97	RANKING
2	26	47	-4.86	1.55	93.05	RANKING
2	27	12	-4.85	1.49	93.05	RANKING
3	1	84	-5.16	0.00	92.81	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
3	2	67	-5.12	0.38	92.63	RANKING
3	3	49	-5.07	0.58	92.64	RANKING
3	4	99	-4.98	0.41	92.86	RANKING
3	5	39	-4.98	1.53	92.38	RANKING
3	6	66	-4.98	1.59	92.29	RANKING
3	7	69	-4.98	1.49	92.56	RANKING
3	8	51	-4.95	1.50	92.55	RANKING
3	9	68	-4.95	1.40	92.57	RANKING
3	10	72	-4.92	1.08	92.74	RANKING
3	11	13	-4.92	1.03	93.00	RANKING
4	1	23	-5.06	0.00	92.21	RANKING
4	2	59	-5.06	0.06	92.19	RANKING
4	3	83	-5.00	0.90	92.42	RANKING
4	4	75	-4.99	0.14	92.25	RANKING
4	5	63	-4.93	0.84	92.42	RANKING
4	6	5	-4.87	1.46	93.19	RANKING
4	7	17	-4.85	1.49	93.20	RANKING
4	8	64	-4.84	1.45	93.18	RANKING
4	9	52	-4.84	1.43	93.17	RANKING
4	10	60	-4.81	1.40	93.08	RANKING
5	1	73	-4.90	0.00	92.06	RANKING
5	2	33	-4.89	0.20	92.12	RANKING
5	3	2	-4.89	0.22	92.08	RANKING
5	4	44	-4.89	0.16	92.03	RANKING
5	5	100	-4.89	0.26	92.08	RANKING
5	6	91	-4.88	0.10	92.11	RANKING
5	7	86	-4.88	0.09	92.04	RANKING
5	8	21	-4.88	0.25	92.09	RANKING
5	9	10	-4.87	0.12	92.11	RANKING
5	10	30	-4.87	0.30	92.05	RANKING
5	11	43	-4.87	0.12	92.04	RANKING
5	12	42	-4.87	0.27	92.07	RANKING
5	13	38	-4.86	0.32	92.05	RANKING
5	14	56	-4.85	0.14	92.01	RANKING
5	15	70	-4.85	0.15	92.11	RANKING
5	16	22	-4.63	1.02	91.17	RANKING

14. 5Y2O Ligan Alami

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	25	-6.95	00.00	01.42	RANKING
1	2	91	-6.95	00.04	01.41	RANKING
1	3	68	-6.95	00.03	01.41	RANKING
1	4	81	-6.95	00.02	01.41	RANKING
1	5	69	-6.95	00.02	01.41	RANKING
1	6	33	-6.95	00.01	01.42	RANKING
1	7	95	-6.95	00.04	01.42	RANKING
1	8	90	-6.95	00.02	01.42	RANKING
1	9	63	-6.95	00.02	01.42	RANKING
1	10	89	-6.95	00.04	01.42	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	11	71	-6.95	00.04	01.41	RANKING
1	12	70	-6.95	00.01	01.42	RANKING
1	13	41	-6.95	00.02	01.42	RANKING
1	14	60	-6.95	00.05	01.41	RANKING
1	15	100	-6.95	00.01	01.43	RANKING
1	16	14	-6.95	00.03	01.42	RANKING
1	17	38	-6.95	00.02	01.43	RANKING
1	18	98	-6.95	00.04	01.42	RANKING
1	19	61	-6.94	00.04	01.42	RANKING
1	20	55	-6.94	00.04	01.42	RANKING
1	21	6	-6.94	00.05	01.41	RANKING
1	22	48	-6.94	00.03	01.41	RANKING
1	23	16	-6.94	00.05	01.42	RANKING
1	24	79	-6.94	00.05	01.41	RANKING
1	25	2	-6.94	00.03	01.42	RANKING
1	26	62	-6.94	00.04	01.43	RANKING
1	27	39	-6.94	00.04	01.42	RANKING
1	28	40	-6.94	00.02	01.43	RANKING
1	29	67	-6.94	00.03	01.43	RANKING
1	30	7	-6.94	00.04	01.42	RANKING
1	31	23	-6.94	00.05	01.42	RANKING
1	32	26	-6.94	00.03	01.42	RANKING
1	33	74	-6.94	00.05	01.41	RANKING
1	34	42	-6.94	00.05	01.41	RANKING
1	35	77	-6.94	00.06	01.42	RANKING
1	36	24	-6.94	00.01	01.42	RANKING
1	37	59	-6.94	00.02	01.42	RANKING
1	38	36	-6.94	00.04	01.41	RANKING
1	39	18	-6.94	00.02	01.42	RANKING
1	40	53	-6.94	00.04	01.42	RANKING
1	41	73	-6.94	00.04	01.41	RANKING
1	42	97	-6.94	00.04	01.43	RANKING
1	43	3	-6.94	00.02	01.42	RANKING
1	44	1	-6.94	00.02	01.43	RANKING
1	45	30	-6.94	00.04	01.43	RANKING
1	46	12	-6.94	00.04	01.43	RANKING
1	47	92	-6.94	00.03	01.41	RANKING
1	48	65	-6.94	00.02	01.43	RANKING
1	49	56	-6.94	00.03	01.42	RANKING
1	50	85	-6.94	00.04	01.43	RANKING
1	51	99	-6.94	00.04	01.43	RANKING
1	52	83	-6.94	00.03	01.43	RANKING
1	53	37	-6.94	00.03	01.43	RANKING
1	54	4	-6.94	00.04	01.41	RANKING
1	55	93	-6.94	00.04	01.42	RANKING
1	56	45	-6.94	00.04	01.43	RANKING
1	57	44	-6.94	00.05	01.44	RANKING
1	58	50	-6.94	00.07	01.42	RANKING
1	59	13	-6.94	00.04	01.43	RANKING
1	60	35	-6.94	00.05	01.43	RANKING
1	61	87	-6.94	00.05	01.42	RANKING
1	62	34	-6.94	00.05	01.42	RANKING

Rank	Sub Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	63	22	-6.94	00.05	01.41	RANKING
1	64	47	-6.94	00.04	01.41	RANKING
1	65	57	-6.94	00.05	01.43	RANKING
1	66	11	-6.94	00.04	01.42	RANKING
1	67	76	-6.94	00.06	01.42	RANKING
1	68	8	-6.94	00.05	01.41	RANKING
1	69	66	-6.94	00.06	01.42	RANKING
1	70	84	-6.94	00.05	01.41	RANKING
1	71	86	-6.93	00.05	01.41	RANKING
1	72	5	-6.93	00.07	01.43	RANKING
1	73	19	-6.93	00.09	01.41	RANKING
1	74	17	-6.93	00.03	01.42	RANKING
1	75	43	-6.93	00.03	01.42	RANKING
1	76	49	-6.93	00.03	01.42	RANKING
1	77	82	-6.93	00.09	01.42	RANKING
1	78	64	-6.93	00.06	01.42	RANKING
1	79	80	-6.93	00.07	01.43	RANKING
1	80	21	-6.93	00.05	01.42	RANKING
1	81	27	-6.93	00.07	01.43	RANKING
1	82	54	-6.93	00.06	01.43	RANKING
1	83	52	-6.93	00.06	01.43	RANKING
1	84	29	-6.93	00.04	01.43	RANKING
1	85	46	-6.93	00.07	01.42	RANKING
1	86	78	-6.93	00.04	01.41	RANKING
1	87	72	-6.93	00.07	01.43	RANKING
1	88	94	-6.93	00.06	01.42	RANKING
1	89	75	-6.93	00.07	01.42	RANKING
1	90	20	-6.93	00.06	01.43	RANKING
1	91	15	-6.93	00.06	01.43	RANKING
1	92	96	-6.93	00.05	01.43	RANKING
1	93	9	-6.93	00.04	01.42	RANKING
1	94	51	-6.93	00.07	01.43	RANKING
1	95	28	-6.93	00.08	01.41	RANKING
1	96	31	-6.93	00.05	01.44	RANKING
1	97	10	-6.93	00.09	01.43	RANKING
1	98	88	-6.92	00.08	01.40	RANKING
1	99	58	-6.92	00.05	01.42	RANKING
1	100	32	-6.91	00.06	01.42	RANKING

Lampiran 2. Hasil Uji Normalitas

1. 5T4B

Tests of Normality

		Kolmogorov-Smirnov[a]			Shapiro-Wilk		
	senyawa	Statistic	df	Sig.	Statistic	df	Sig.
afinitas	2-Heptanone	,321	3	.	,881	3	,328
	5-Hydroxytryptamine	,253	3	.	,964	3	,637
	Kaempferol	,304	3	.	,907	3	,407
	Rhamnocitrin	,328	3	.	,871	3	,298
	Rhamnetin	,236	3	.	,977	3	,712
	5-Methoxytryptamine	,187	3	.	,998	3	,915
	sitagliptin	,292	3	.	,923	3	,463

a. Lilliefors Significance Correction

2. 5Y2O

Tests of Normality

		Kolmogorov-Smirnov[a]			Shapiro-Wilk		
	senyawa	Statistic	df	Sig.	Statistic	df	Sig.
afinitas	2-Heptanone	,175	3	.	1,000	3	1,000
	5-Hydroxytryptamine	,349	3	.	,832	3	,194
	Kaempferol	,343	3	.	,842	3	,220
	Rhamnocitrin	,253	3	.	,964	3	,637
	Rhamnetin	,292	3	.	,923	3	,463
	5-Methoxytryptamine	,204	3	.	,993	3	,843
	ligan alami	,292	3	.	,923	3	,463

a. Lilliefors Significance Correction

Lampiran 3. Hasil Uji Homogenitas

1. 5T4B

Test of Homogeneity of Variance

		Levene Statistic	df1	df2	Sig.
afinitas	Based on Mean	3,319	6	14	,030
	Based on Median	1,498	6	14	,249
	Based on Median and with adjusted df	1,498	6	4,074	,360
	Based on trimmed mean	3,176	6	14	,035

2. 5Y2O

Test of Homogeneity of Variance

		Levene Statistic	df1	df2	Sig.
afinitas	Based on Mean	4,649	6	14	,008
	Based on Median	,590	6	14	,733
	Based on Median and with adjusted df	,590	6	3,547	,732
	Based on trimmed mean	4,052	6	14	,015

Lampiran 4. Hasil Uji ANOVA

1. 5T4B

ANOVA

afinitas

	Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
Between Groups	36,996	6	6,166	866,120	,000
Within Groups	,100	14	,007		
Total	37,095	20			

2. 5Y2O

ANOVA

afinitas

	Sum of Squares	df	Mean Square	F	Sig.
Between Groups	20,006	6	3,334	1570,003	,000
Within Groups	,030	14	,002		
Total	20,036	20			

Lampiran 5. Bebas Etik



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 E-mail : s1farmasi@unimugo.ac.id

No Seri: 04 SRT/SPTEK/2025

SURAT PERNYATAAN
TIDAK MELAKUKAN ETIK PENELITIAN

Gombong, 01 mei 2025

Assalamu'alaikum wr wb

Saya yang bertanda tangan dibawah ini:

Nama : ashkadia luh zahra
NIM : 2021050007
Prodi : Farmasi Program Sarjana
Judul skripsi : STUDI IN SILICO POTENSI TANAMAN CENGKEH (Syzygium aromaticum) PADA PENGOBATAN DIABETES MELITUS TIPE 2

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

Peneliti

ashkadia luh zahra
NIM. 2021050007

Mengetahui,
Dosen Pembimbing Utama

Dr. apt. Muh Husnul Khuluq, M Farm
NIDN. 0620076601

Lampiran 6. Uji Turnitin

UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH GOMBONG
PERPUSTAKAAN
Jl. Yos Sudarso No. 461, Telp./Fax. (0287) 472433 GOMBONG, 54412
Website : https://library.unimugo.ac.id/ E-mail
: lib.unimugo@gmail.com

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 : STUDI IN SILICO POTENSI TANAMAN CENGKEH (Syzygium aromaticum) PADA PENGOBATAN DIABETES MELITUS TIPE 2

Nama : Ashkadia Luh Zahra
NIM : 2021050007
Program Studi : S1 Farmasi
Hasil Cek : 24%

Gombong, 02 Mei 2025

Mengetahui,

Pustakawan

(Dwi Sudarsih, ...)

Kepala UPT Perpustakaan, Multimedia, SIM, dan IT

(Sawiji, M.Sc)

Lampiran 7. Lembar Bimbingan

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

Nama mahasiswa : ASHKADIA LUH ZAHRA
NIM : 2021050007
Nama Pembimbing : Drs. apt. MUHAMMAD HUSNUL KHULUQ M. Farm

Tanggal Bimbingan	Topik/Materi Bimbingan	Paraf Mahasiswa	Paraf Pembimbing
24/9 24	BIMBINGAN JUDUL		
25/9 24	ACC JUDUL		
5/9 24	BIMBINGAN BAB I		
8/10 24	ACC BAB I		
18/10 24	BIMBINGAN BAB II		
5/11 24	ACC BAB II		
5/11 24	BIMBINGAN BAB III		
13/11 24	ACC BAB III		
13/11 24	BIMBINGAN SEMPRO		

Gombong, 27 Bulan 12 Tahun 2024

Mengetahui
Ketua Program Studi Farmasi

apt. Naeluz Zukhruf WK., M.Pharm.Sci
NIDN : 0618109202

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

Nama mahasiswa : Ashkadia Luh Zahra
NIM : 2021050007
Nama Pembimbing : Dr. apt. Muh Husnul Khuluq., M.Farm

Tanggal Bimbingan	Topik/Materi Bimbingan	Paraf Mahasiswa	Paraf Pembimbing
	BIMBINGAN BAB IV		
	BIMBINGAN DOCKING		
	BIMBINGAN SPSS		
	BIMBINGAN PEMBAHASAN		
	REVISI BAB IV		
	ACC BAB IV		
	BIMBINGAN BAB V		
	ACC BAB V		

Gombong, 07 Bulan 05 Tahun 2025
Mengetahui
Ketua Program Studi Farmasi

Dr. apt. Nadya Zukhri, S.K.M., K., M.Pharm.Sci
NIDN : 0611181902

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

Nama mahasiswa : ASYKADIN LUTFI ZAINI
NIM : 2021[redacted]
Nama Pembimbing : [redacted] SUDENG SUPRIYANTO M. Farm

Tanggal Bimbingan	Topik/Materi Bimbingan	Paraf Mahasiswa	Paraf Pembimbing
24/9	BIMBINGAN JUDUL		
25/9	ACC JUDUL		
25/9	BIMBINGAN BAB I		
18/10	ACC BAB I		
18/10	BIMBINGAN BAB II		
5/11	ACC BAB II		
5/11	BIMBINGAN BAB III		
13/11	ACC BAB III		
13/11	BIMBINGAN SEMPRO		

Gombong, 27 Bulan 12 Tahun 2024

Mengetahui
Ketua Program Studi Farmasi

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

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

Nama mahasiswa : Ashkadia Luh Zahra
NIM : 2021050007
Nama Pembimbing : Sugeng Supriyanto., M.S.Farm

Tanggal Bimbingan	Topik/Materi Bimbingan	Paraf Mahasiswa	Paraf Pembimbing
	BIMBINGAN BAB IV		
	BIMBINGAN DOCKING		
	BIMBINGAN SPSS		
	BIMBINGAN PEMBAHASAN		
	REVISI BAB IV		
	ACC BAB IV		
	BIMBINGAN BAB V		
	ACC BAB V		

Gombong, 07 Bulan 09 Tahun 2025

Mengetahui,
Ketua Program Studi Farmasi

Dr. apt. [illegible], M.Pharm.Sci
NIDN [illegible]