

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA KURKUMIN, PIPERIN, DAN
MANGOSTIN SEBAGAI KANDIDAT ANTIBAKTERI PADA
UNGGAS**

SKRIPSI

**SOFY FIRJATULLAH
A211079**



**SEKOLAH TINGGI FARMASI INDONESIA
YAYASAN HAZANAH
BANDUNG
2025**

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA KURKUMIN, PIPERIN, DAN
MANGOSTIN SEBAGAI KANDIDAT ANTIBAKTERI PADA
UNGGAS**

SKRIPSI

Sebagai salah satu untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi

**SOFY FIRJATULLAH
A211079**



**SEKOLAH TINGGI FARMASI INDONESIA
YAYASAN HAZANAH
BANDUNG
2025**

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA KURKUMIN, PIPERIN, DAN MANGOSTIN
SEBAGAI KANDIDAT ANTIBAKTERI PADA UNGGAS**

**SOFY FIRJATULLAH
A211079**

Juli 2025

Disetujui Oleh:

Pembimbing



Umi Baroroh, S.Si., M.Biotek.

Pembimbing



Dr. apt. Dewi Astriany, M.Si.

Kutipan atau saduran baik sebagian ataupun seluruh naskah, harus menyebut nama pengarang dan sumber aslinya, yaitu Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia.

Skripsi ini saya persembahkan dengan penuh cinta dan rasa syukur kepada ayahanda Hendra M. dan Ibunda Sulastri, yang selalu menjadi sumber kekuatan dalam setiap langkah hidup saya dan pengorbanan tanpa henti sepanjang hidup saya. Setiap tetes keringat dan air mata mereka menjadi pijakan kuat bagi setiap langkah yang saya ambil hingga akhirnya saya mampu menggapai impian terbesar saya. Terima kasih telah menjadi pelabuhan yang tenang dalam perjalanan panjang ini. Dukungan dan kehadiranmu sungguh berarti dalam setiap proses yang saya jalani. Semoga ayah dan ibu sehat, panjang umur, dan bahagia selalu.

ABSTRAK

Penggunaan *Antibiotic Growth Promoter* (AGP) dalam industri peternakan ayam telah memicu kekhawatiran terhadap resiko resistensi antimikroba. Oleh karena itu, diperlukan alternatif antimikroba yang lebih aman dan efektif. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi kurkumin, piperin, dan mangostin sebagai kandidat senyawa pengganti AGP melalui pendekatan *in silico*. Proses yang dilakukan meliputi penambatan molekuler terhadap enzim target LpxC, dilanjutkan dengan simulasi dinamika molekuler selama 100 ns, serta analisis interaksi ikatan hidrogen dan estimasi energi ikatan menggunakan metode MM-GBSA. Hasil penambatan molekul menunjukkan bahwa ketiga senyawa mampu berinteraksi dengan kuat pada situs aktif enzim target. Selama simulasi, ketiga ligan tetap stabil di dalam kantung pengikatan tanpa mengalami perpindahan posisi yang berarti. Parameter analisis seperti RMSD, RMSF, dan jumlah ikatan hidrogen mendukung bahwa kompleks enzim-ligan yang terbentuk cukup stabil, dan berpotensi sebagai agen antimikroba alami. Berdasarkan hasil perhitungan energi bebas ikatan ligan asli 2CW memiliki nilai energi -45,61 kcal/mol, sedangkan ligan uji mangostin, kurkumin, piperin masing-masing -46,66 kcal/mol, -31,73 kcal/mol dan -23,17 kcal/mol. Hal ini menunjukkan bahwa mangostin merupakan senyawa uji dengan afinitas pengikat terbaik. Temuan ini memberikan dasar ilmiah bahwa kurkumin, piperin, dan mangostin dapat dijadikan kandidat awal sebagai pengganti AGP pada ayam, serta dapat diarahkan penelitian lanjutan secara eksperimental.

Kata Kunci: AGP, ayam, kurkumin, piperin, mangostin, *in silico*, LpxC.

ABSTRACT

The use of Antibiotic Growth Promoters (AGPs) in the poultry industry has raised concerns regarding the risk of antimicrobial resistance. Therefore, safer and more effective natural alternatives are urgently needed. This study aims to evaluate the potential of curcumin, piperin, and mangostin as candidate compounds to replace AGPs through an in silico approach. The methods employed include molecular docking against the target enzyme LpxC, followed by molecular dynamics (MD) simulation for 100 ns, as well as hydrogen bond interaction analysis and binding energy estimation using the MM-GBSA method. Docking results showed that all three compounds could interact strongly at the active site of the target enzyme. During the simulation, the ligands remained stable within the binding pocket without significant positional displacement. Analytical parameters such as RMSD, RMSF, and hydrogen bond count indicated that the enzyme-ligand complexes were stable and potentially effective as natural antimicrobial agents. Based on binding free energy calculations, the native ligand 2CW has a binding energy of -45,61 kcal/mol, while the test ligands mangostin, curcumin, and piperine have binding energies of -46,66 kcal/mol, -31,73 kcal/mol, and -23,17 kcal/mol. These findings provide a scientific basis suggesting that curcumin, piperine, and mangostin may serve as initial candidates for AGP alternatives in chickens, warranting further experimental investigation.

Keywords: *AGPs, chicken, curcumin, piperine, mangostin, in silico, LpxC.*

KATA PENGANTAR

Bismillahirrahmanirrahim,

Puji dan syukur penulis panjatkan ke hadirat Allah SWT atas segala berkah rahmat dan ridho-Nya penulis dapat menyelesaikan penelitian dan penulisan skripsi yang berjudul **“Studi *In Silico* Senyawa Kurkumin, Piperin, dan Mangostin sebagai Kandidat Antibakteri pada Unggas”**.

Penelitian dan penulisan skripsi ini dilakukan untuk memenuhi salah satu syarat untuk mendapatkan gelar sarjana pada Program Studi Sarjana Farmasi Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia.

Penulis mengucapkan terima kasih kepada dosen pembimbing Umi Baroroh, S.Si., M.Biotek. dan Dr. apt. Dewi Astriany, M.Si. atas bimbingan, nasihat, dukungan, serta pengorbanan yang telah diberikan. Pada kesempatan ini, tidak lupa penulis mengucapkan terima kasih yang sebesar- besarnya kepada:

1. Dr. apt. Adang Firmansyah, M.Si., selaku Ketua Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia,
2. Dr. apt. Diki Prayugo, M.Si., selaku Wakil Ketua I Bidang Akademik,
3. Dr. apt. Wiwin Winingsih, M.Si., selaku Ketua Program Studi Sarjana Farmasi,
4. Himalaya Wana Kelana, M.Pd., selaku Dosen Wali yang telah banyak memberikan bimbingan dan arahan kepada penulis,
5. Seluruh staf dosen, staf administrasi, serta karyawan Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia,
6. Putri Rafika Helsi, S.Ak., selaku kakak kandung penulis yang selalu setia membantu dan mendukung selama masa perkuliahan hingga penyusunan skripsi ini, atas segala perhatian, bantuan, serta nasihat-nasihat yang selalu mengiringi langkah penulis, meskipun kadang disampaikan dengan gaya khas yang tidak pernah berubah,
7. Sahabat dan teman seperjuangan yang telah menjadi rumah kedua bagi penulis, serta segala canda, tawa, pengalaman, dan dukungan yang luar biasa sehingga penulis bisa menyelesaikan skripsi ini bersama kalian di Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia,

Dalam penyusunan skripsi ini masih banyak kesalahan dan kekurangan karena pengetahuan yang masih sangat terbatas. Oleh karena itu, dengan kerendahan hati diharapkan masukan berupa kritik dan saran yang bersifat membangun untuk perbaikan di masa yang akan datang. Penulis berharap semoga tugas akhir ini akan memberikan manfaat bagi penulis sendiri dan juga bagi pihak lain yang berkepentingan.

Bandung, Juli 2025
Penulis

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN	i
KUTIPAN.....	ii
LEMBAR PERSEMBAHAN	iii
ABSTRAK	iv
<i>ABSTRACT</i>	v
KATA PENGANTAR.....	vi
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR TABEL.....	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Identifikasi Masalah.....	3
1.3 Tujuan Penelitian	3
1.4 Kegunaan penelitian.....	3
1.5 Waktu dan Tempat Penelitian.....	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Kurkumin	4
2.2 Piperin	4
2.3 Mangostin	5
2.4 LpxC	6
2.5 Penambatan Molekul	7
2.6 Simulasi Dinamika Molekuler	7
BAB III TATA KERJA.....	9
3.1 Alat.....	9
3.2 Bahan	9
3.3 Metode penelitian.....	9
3.3.1 Penambatan Molekuler	9
3.3.2 Dinamika Molekuler	10
BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	12
4.1 Penambatan Molekul	12
4.1.1 Preparasi Molekuler ligan dan reseptor	12
4.1.2 Validasi Metode Penambatan Molekul	14

4.1.3 Analisis dan Visualisasi Hasil.....	14
4.2 Dinamika Molekuler	21
4.2.1 Parameterisasi Ligan.....	21
4.2.2 Persiapan Sistem	21
4.2.3 Minimisasi Sistem.....	22
4.2.4 Pemanasan	23
4.2.5 Ekuilibrasi.....	23
4.2.6 Produksi Dinamika Molekul.....	24
4.2.7 RMSD dan RMSF.....	24
4.2.8 Analisis Ikatan Hidrogen	29
4.2.9 MM-GBSA	32
4.2.10VMD (<i>Visual Molecular Dynamics</i>).....	34
BAB V SIMPULAN DAN ALUR PENELITIAN SELANJUTNYA.....	36
5.1 Simpulan	36
5.2 Alur Penelitian Selanjutnya	36
DAFTAR PUSTAKA	37
LAMPIRAN	42

DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
2.1 Struktur 2D Kurkumin.....	4
2.2 Struktur 2D Piperin.....	5
2.3 Struktur 2D Mangostin	6
2.4 Struktur LpxC	7
4.1 Pemisahan	12
4.2 Ligan Uji menyamakan dengan ligan asli.....	13
4.3 Visualisasi Ligan Asli 2CW dengan Enzim LpxC.....	18
4.4 Visualisasi Ligan Uji Kurkumin dengan Enzim LpxC	19
4.5 Visualisasi Ligan Uji Piperin dengan Enzim LpxC	20
4.6 Visualisasi Ligan Uji Mangostin dengan Enzim LpxC	20
4.7 Simulasi Dinamika Molekuler menggunakan TIP3BOX	22
4.8 Grafik Analysis Ekuilibraasi.....	24
4.9 Grafik RMSD.....	27
4.10 Hasil Grafik RMSF	28
4.11 Grafik Hasil Perhitungan MM-GBSA	34
4.12 Visualiasasi Dinamika Molekuler.....	35

DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
4.1 Hasil Energi Bebas Ikatan dan Konstanta Inhibisi	15
4.2 Interaksi 4mqy dengan Ligan Asli dan Ligan Uji.....	17
4.3 Pengecekan Muatan Kompleks Ligan dengan LpxC.....	22
4.4 Hasil Ikatan Hidrogen pada ligan 2CW	29
4.5 Hasil Ikatan Hidrogen pada ligan kurkumin.....	30
4.6 Hasil Ikatan Hidrogen pada ligan piperin	31
4.7 Hasil Ikatan Hidrogen pada ligan mangostin.....	31
4.8 Perhitungan MM-GBSA	33

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran	Halaman
1. Hasil Penambatan Molekul.....	42
2. Persiapan Sistem.....	44
3. Input File Minimisasi Sistem, Pemanasan, Dan Ekuilibrasi.....	46
4. Produksi Dinamika Molekuler.....	51
5. Hasil Analisis Ikatan Hidrogen.....	52
6. Hasil Mm-Gbsa Pada Kompleks Ligan Dengan Enzim	53

DAFTAR PUSTAKA

- Abdurrahman, F., Tahir, I. & Fajar Pradipta, M., 2018, 'Desain Sintesis Polimer Tercetak Molekular Brasilein Dengan Simulasi Dinamika Molekuler', *Prosiding Snkp*.
- Agung, A., Sekarini, A.D., Krissanti, I., Rizky, M. & Syamsunarno, A.A., 2020, 'Efektivitas Antibakteri Senyawa Kurkumin Terhadap Foodborne Bacteria: Tinjauan Curcuma Longa Untuk Mengatasi Resistensi Antibiotik', *J. Sains Kes.*, 2(4).
- Albuquerque, B.R., Dias, M.I., Pinela, J., Calhelha, R.C., Pires, T.C.S.P., Alves, M.J., Corrêa, R.C.G., Ferreira, I.C.F.R., Oliveira, M.B.P.P. & Barros, L., 2023, 'Insights Into The Chemical Composition And In Vitro Bioactive Properties Of Mangosteen (Garcinia Mangostana L.) Pericarp', *Foods*, 12(5).
- Alfian, Amin Nurul & Munir, 2015, 'Pengaruh Pemberian Tepung Lempuyang (Zingiber Aromaticum Val) Dan Tepung Kunyit (Curcuma Domesticus) Terhadap Konsumsi Dan Konversi Ransum Broiler', *Jurnal Galung Tropika*, 50–59.
- Aman, L.O., Sihaloho, M. & Arfan, A., 2023, 'Pencarian Inhibitor Dyrk2 Dari Database Bahan Alam Zinc15: Analisis Farmakofor, Simulasi Docking Dan Dinamika Molekuler', *Jurnal Sains Farmasi & Klinis*, 10(1), 100.
- Auliya Dasilva, J., 2024, *Studi Simulasi Dinamika Molekul Pada Senyawa Brazilin Sebagai Antikanker Payudara* – Phd Thesis .
- Ballo, E.M., Kallau, N.H.G. & Ndaong, N.A., 2023, *Kajian Review Resistensi Escherichia Coli Terhadap Antibiotik B-Laktam Dan Aminoglikosida Pada Ternak Ayam Dan Produk Olahannya Di Indonesia*.
- Besung, I.N.K., Suarjana, I.G.K. & Tono Pg, K., 2019, 'Resistensi Antibiotik Pada Escherichia Coli Yang Diisolasi Dari Ayam Petelur (Antibiotic Resistance To Escherichia Coli Isolated From Laying Hens)', *Buletin Veteriner Udayana*, 11, 28–32.
- Candra, G.N.H. & Wijaya, I.M.A.P., 2021, 'Molecular Docking Kaempferol Sebagai Antiinflamasi Pada Aterosklerosis Secara In Silico', *Jurnal Ilmiah Medicamento*, 7(1), 13–18.
- Cohen, F., Aggen, J.B., Andrews, L.D., Assar, Z., Boggs, J., Choi, T., Dozzo, P., Easterday, A.N., Haglund, C.M., Hildebrandt, D.J., Holt, M.C., Joly, K., Jubb, A., Kamal, Z., Kane, T.R., Konradi, A.W., Krause, K.M., Linsell, M.S., Machajewski, T.D., Miroshnikova, O., Moser, H.E., Nieto, V., Phan, T., Plato,

- C., Serio, A.W., Seroogy, J., Shakhmin, A., Stein, A.J., Sun, A.D., Sviridov, S., Wang, Z., Wlasichuk, K., Yang, W., Zhou, X., Zhu, H. & Cirz, R.T., 2019, 'Optimization Of Lpxc Inhibitors For Antibacterial Activity And Cardiovascular Safety', *Chemmedchem*, 14(16), 1560–1572.
- Dai, C., Lin, J., Li, H., Shen, J., Shen, Z., Wang, Y. & Velkov, T., 2022, *The Natural Product Curcumin As An Antibacterial Agent: Current Achievements And Problems*, *Antioxidants*, 11(3).
- Dermawan, D., Sumirtanuridin, R. & Dewantisari, D., 2019, *Molecular Dynamics Simulation Of Estrogen Receptor Alpha Against Andrografolid As Anti Breast Cancer*.
- Dinata1, D.I., Peni1, M.I., Asnawil, A., Ligan, I., Receptor, A., Ii, B. & Pegagan, D.E., 2023, *Identification Of Angiotensin Receptor Blocker Ii Ligands From Gotu Kola (Centella Asiatica L.) Extract: An In Silico Study*, Vol. 5.
- Elfita, L., Apriadi, A., Supandi, S. & Dianmurdedi, S., 2023, 'Studi Penambatan Molekuler Dan Simulasi Dinamika Molekuler Senyawa Turunan Furanokumarin Terhadap Reseptor Estrogen Alfa (Er-A) Sebagai Anti Kanker Payudara', *Jurnal Sains Farmasi & Klinis*, 9(3), 255.
- El-Rayes, T., Emara, A. & Abouzeid, A., 2023, 'Effect Of Piperine As An Alternative Phytogetic Additive To Antibiotic On Broiler Productivity, Carcass Traits And Oxidative Status', *Journal Of Sustainable Agricultural And Environmental Sciences*, 2(4), 11–17.
- Erwin, A.L., 2016, 'Antibacterial Drug Discovery Targeting The Lipopolysaccharide Biosynthetic Enzyme Lpxc', *Cold Spring Harbor Perspectives In Medicine*, 6(7).
- Fatriansyah, J.F., Rizqillah, R.K., Yandi, M.Y., Fadilah & Sahlan, M., 2022, 'Molecular Docking And Dynamics Studies On Propolis Sulabiroin-A As A Potential Inhibitor Of Sars-Cov-2', *Journal Of King Saud University - Science*, 34(1).
- Fransiska, A.N., Nola Odhia, F., Kurnawati Putri, G., Setyasna, P., Setya Tyasna, P., Rafika Putri, T. & Nurfadhila, L., 2023, 'Literature Review: Molecular Docking Aktivitas Senyawa Antioksidan Alami Pada Beberapa Tanaman Di Indonesia', *Jurnal Farmasetis*, 12(1).
- Gumiwang, W.D.N., Sulisetijono & Setiowati, F.K., 2024, 'Analisis Molekuler Docking Senyawa Daun Sirsak (Annona Muricata L.) Sebagai Antidepresan Terhadap Reseptor Monoamine Oxidase A', *Biota : Jurnal Ilmiah Ilmu-Ilmu Hayati*, 247–257.

- Haq, I.U., Imran, M., Nadeem, M., Tufail, T., Gondal, T.A. & Mubarak, M.S., 2021, *Piperine: A Review Of Its Biological Effects, Phytotherapy Research*, 35(2), 680–700.
- Haryanti, S., Widayanti, E. & Widiyastuti, Y., 2017, *Aktivitas Sitotoksik Ekstrak Air Dan Etanol Kulit Manggis (Garcinia Mangostana Linn.) Pada Beberapa Model Sel Kanker*, Vol. 10.
- Idawati, S., Hakim, A. & Andayani, Y., 2018, 'Isolasi A-Mangostin Dari Kulit Buah Manggis (*Garcinia Mangostana* L.) Dan Uji Aktivitas Antibakteri Terhadap *Bacillus Cereus*', *Mataram*, 118(2).
- Ikhlas, E.N., Rahmawati Rizkuloh, L. & Mardianiingrum, R., 2023, 'Analisa In Silico Senyawa Biji Lada Hitam (*Piper Nigrum* L.) Terhadap Aktivitas Antioksidan', *Jurnal Riset Rumpun Ilmu Kesehatan*, 2(2), 301–321.
- Khare, T., Anand, U., Dey, A., Assaraf, Y.G., Chen, Z.S., Liu, Z. & Kumar, V., 2021, *Exploring Phytochemicals For Combating Antibiotic Resistance In Microbial Pathogens, Frontiers In Pharmacology*, 12.
- Kim, D.H., Yang, H.M., Song, J.Y., Park, J., Kwon, B.Y., Vu, A.V., Lee, D.S. & Lee, K.W., 2024, 'Effects Of Dietary Mangosteen Peel Powder And Extract On The Growth Performance, Meat Quality And Indicators For Immunity, Gut Health And Antioxidant Activity In Broiler Chicks', *Poultry Science*, 103(12).
- Kumar Pal, S. & Kumar, T., 2023, 'The In-Silico Hunt For The Inhibitor Against Lpxc Enzyme From *Salmonella Typhi* From Natural Product Derivatives', *International Journal Of Innovation And Multidisciplinary Research (Ijiamr)*, 3(2).
- Kurnia, S.N. & Ruswanto, 2019, 'Studi Komputasi Senyawa 1,3-Bis(Methylsulfinyl)Benzene Dengan Metode Simulasi Dinamika Molekuler Pada Aplikasi Gromacs 2019', *Open Journal Systems*, (Repository Bth).
- Lee, C.J., Liang, X., Gopalaswamy, R., Najeeb, J., Ark, E.D., Toone, E.J. & Zhou, P., 2014, 'Structural Basis Of The Promiscuous Inhibitor Susceptibility Of *Escherichia Coli* Lpxc', *Acs Chemical Biology*, 9(1), 237–246.
- Level, P., Probiotik, P., Ekstrak, D., Balakka, B., Karkas, T.P., Karkas, B.-B., Broiler, A., Hutasuhut, U., Rianita, R. & Hafni, S., 2023, 'The Effect Of Level Supplemented Probiotics And Balakka Fruit Extract (*Phyllanthus Emblica* L.) On Percentage Of Carcass Weight And Carcass Parts Of Broiler Chickens', *Jurnal Ilmu Dan Industri Peternakan*, 9, 74–89.
- Mukti, A., Rastina, Harris, A., Ismail, Darniati & Masyitha, D., 2017, 'Resistensi *Escherichia Coli* Terhadap Antibiotik Dari Daging Ayam Broiler Di Pasar Rukoh', *Jimvet*, 01(3), 492–498.

- Muttaqin, F.Z., Ferdian Pratama, M., Kurniawan, F., Tinggi, S. & Bandunng, F., 2019, *Molecular Docking And Molecular Dynamic Studies Of Stilbene Derivative Compounds As Sirtuin-3 (Sirt3) Histone Deacetylase Inhibitor On Melanoma Skin Cancer And Their Toxicities Prediction*, Vol. 2.
- Ningsih, N., Ahmad Zulfian, T., Mahbuba We Tenri Gading, B., Peternakan, J. & Negeri Jember Jl Mastrip Box, P.P., 2021, 'Meat Bone Ratio (Mbr) Potongan Komersial Karkas Ayam Broiler Dengan Nanoenkapsulasi Ekstrak Buah Mahkota Dewa (Meat Bone Ratio (Mbr) Commercial Part Of Broiler Chickens Carcass With Nanoencapsulation Of Mahkota Dewa Fruits Extract)', ©*Jurnal Sains Dan Teknologi Peternakan*, 3(1).
- Puspita, P.J., Liliyani, N.P. & Ambarsari, L., 2022, 'In Silico Analysis Of Active Compounds Of Avocado Fruit (Persea Americana Mill.) As Tyrosinase Enzyme Inhibitors', *Curr: Biochem*, 9.
- Ramadhan, D.S.F., Luh Astri Indraswari, N., Hakim, S., Rusli, R., Nurisyah, N., Asikin, A., Muhammad Fakhri, T. & Askar, M., 2024, 'Identifikasi Metabolit Bioaktif Pada Asam Jawa (Tamarindus Indica L.) Menggunakan Komputasi Dinamika Molekuler Untuk Penargetan Her-2 Kanker Payudara', *Jurnal Mandala Pharmacoon Indonesia (Jmpi)*, 10(1), 268–279.
- Rena, S.R., Nurhidayah, N. & Rustan, R., 2022a, 'Analisis Molecular Docking Senyawa Garcinia Mangostana L Sebagai Kandidat Anti Sars-Cov-2', *Jurnal Fisika Unand*, 11(1), 82–88.
- Rena, S.R., Nurhidayah, N. & Rustan, R., 2022b, 'Analisis Molecular Docking Senyawa Garcinia Mangostana L Sebagai Kandidat Anti Sars-Cov-2', *Jurnal Fisika Unand*, 11(1), 82–88.
- Sari Dewi, R., Anggraeni, A., Bahti, H.H., Yusuf, M., Hardianto, A. & Abdul Mutholib, D., 2022, *Simulasi Dinamika Molekuler Ligan Disekunderbutil Ditiofosfat (Dsbdt) Untuk Ekstraksi Logam Tanah Jarang*.
- Sari, I.W., Junaidin, J. & Pratiwi, D., 2020, 'Studi Molecular Docking Senyawa Flavonoid Herba Kumis Kucing (Orthosiphon Stamineus B.) Pada Reseptor A-Glukosidase Sebagai Antidiabetes Tipe 2', *Jurnal Farmagazine*, 7(2), 54.
- Sidik, M.R., Yulianti, Y. & Asmi, D., 2020, *Analisis Dinamika Molekuler Pengaruh Suhu Tubuh Terhadap Keseimbangan Volume Human Serum Albumin (Hsa) Menggunakan Model Potensial Lennard-Jones*, Vol. 08.
- Viranti, M., 2023, *Studi In Silico Senyawa Andrografolid Dari Tanaman Sambiloto (Andrographis Paniculata (Burm F.) Ness) Sebagai Antikanker Kolorektal – Phd Thesis*.

Yusuf Z, Halim Natsir M & Sjojfan O, 2024, 'In Silico Study Of Bioactive Compounds From Yellow Bioherbal As Potential Lpxc Protein Inhibitors For Controlling Pathogenic Bacteria In Broiler Chicken Intestinal', *Indonesian Journal Of Animal Science*), 34(1), 87–98.