

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA KURKUMIN, MAGOSTIN, DAN
PIPERIN SEBAGAI PENEKAN SELEKTIF AKTIVITAS iNOS
PADA AYAM (*Gallus gallus*)**

SKRIPSI

GINASTI APRILIANI

A211055



**SEKOLAH TINGGI FARMASI INDONESIA
YAYASAN HAZANAH
BANDUNG**

2025

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA KURKUMIN, MAGOSTIN, DAN
PIPERIN SEBAGAI PENEKAN SELEKTIF AKTIVITAS iNOS
PADA AYAM (*Gallus gallus*)**

SKRIPSI

Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi

GINASTI APRILIANI

A211055



SEKOLAH TINGGI FARMASI INDONESIA

YAYASAN HAZANAH

BANDUNG

2025

**STUDI *IN SILICO* SENYAWA KURKUMIN, MANGOSTIN, DAN PIPERIN
SEBAGAI PENEKAN SELEKTIF AKTIVITAS iNOS PADA AYAM (*Gallus gallus*)**

GINASTI APRILIANI

A 211 055

Oktober 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 menyebab nama pengarang dan sumber aslinya, yaitu Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia.

Skripsi ini saya persembahkan untuk orang terdekat saya, khususnya orang tua yang tersayang karena mendampingi dan mengiringi setiap langkah dengan doa

ABSTRAK

Ayam broiler merupakan sumber protein hewani yang memiliki produktivitas tinggi dan kandungan gizi yang baik, namun rentan terhadap gangguan kesehatan terutama peradangan saluran cerna. Peradangan ini dapat disebabkan oleh beberapa faktor, baik secara patogen maupun non-patogen, dan berdampak pada penurunan performa pertumbuhan serta kualitas daging. Oleh karena itu, pendekatan alternatif dengan penggunaan senyawa alami dengan aktivitas antiinflamasi menjadi fokus penelitian. Senyawa kurkumin, mangostin, dan piperin diketahui memiliki potensi sebagai antiinflamasi melalui penghambatan ekspresi *Inducible Nitric Oxide Synthase* (iNOS). Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui ligan yang memiliki sifat inhibitor paling tinggi menggunakan metode *in silico* dengan cara penambatan molekuler dan dinamika molekuler. Proses penambatan molekuler dilakukan dengan menggunakan AutoDock Vina, sedangkan AMBER digunakan untuk dinamika molekuler dilakukan selama 100 ns. Hasil penambatan molekul menunjukkan bahwa kurkumin memiliki energi ikatan bebas sebesar -9,3 kkal/mol dengan ikatan hidrogen dan gaya *Van der Waals*. Analisis dinamika molekuler mengungkapkan bahwa kurkumin juga merupakan ligan dengan stabilitas yang baik, ditunjukkan dengan nilai RMSD < 2,5 Å, berinteraksi secara ikatan hidrogen dan kalkulasi energi ikatan MMGBSA sebesar -45,25 kkal/mol. Berdasarkan hasil ini, kurkumin berpotensi sebagai kandidat inhibitor iNOS yang stabil secara struktural.

Kata kunci: Penambatan molekuler, dinamika molekuler, iNOS, kurkumin, mangostin, piperin

ABSTRACT

Broiler chicken is a source of high protein with good nutritional content, but they are susceptible to health problems, particularly gastrointestinal inflammation. This inflammation can be caused by various factors, both pathogenic and non-pathogenic, and affects the reduction of growth performance and meat quality. Therefore, alternative approaches using natural compounds with anti-inflammatory activity are the focus of research. The compounds curcumin, mangostin, and piperine are known to have anti-inflammatory potential through the inhibition of Inducible Nitric Oxide Synthase (iNOS) expression. This study aims to identify the ligand with the highest inhibitory potential using in silico methods, including molecular docking and molecular dynamics. Molecular docking was performed using AutoDock Vina, meanwhile, AMBER was used for molecular dynamics simulations performed 100 ns. The molecular docking results showed that curcumin has a free binding energy of -9,3kcal/mol with hydrogen bonds and Van der Waals interactions. Molecular dynamics analysis revealed that curcumin is also a stable ligand, shown by an RMSD value of < 2,5 Å, interacting with hydrogen bonds and calculating a binding energy of -45,25kcal/mol using the MMGBSA method. Based on these results, curcumin has the potential to be a candidate inhibitor of iNOS with structural stability.

Keyword: *Docking, molecular dynamic, iNOS, curcumin, mangostin, piperine*

KATA PENGANTAR

Bismillahirrahmanirrahim,

Segala puji dan syukur kehadiran Allah SWT, atas segala nikmat, rahmat dan ridho-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan penelitian dan penulisan skripsi yang berjudul **“Studi *In Silico* Senyawa Kurkumin, Mangostin, dan Piperin Sebagai Penekan Selektif Aktivitas iNOS Pada Ayam (*Gallus gallus*)”**. Penelitian serta penulisan skripsi ini dilakukan untuk memenuhi salah satu syarat kelulusan untuk mendapatkan gelar sarjana pada Program Studi Sarjana Farmasi Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia.

Pertama-tama, penulis mengucapkan rasa terimakasih yang mendalam kepada kedua orang tua tercinta yaitu Tarya dan Nenah Nurhaenah serta tak lupa pada kakak tersayang Rosana Nurfahziah karena atas dukungan baik secara finansial, moral, mental dan doa yang tulus yang selalu mengiringi penulis dalam setiap langkah yang dituju.

Penulis juga mengucapkan terimakasih banyak kepada ibu Umi Baroroh, S.Si., M.Biotek selaku pembimbing satu dan ibu Dr. apt. Dewi Astriany, M.Si selaku dosen pembimbing dua dan wali dosen atas arahan, saran, dukungan serta nasehat yang berharga yang tidak akan penulis lupakan. Pada kesempatan ini, penulis juga tidak lupa untuk mengucapkan terimakasih 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. Hesti Riasari, M.Si., selaku Ketua Program Studi Sarjana Farmasi,
4. Betty Handayani, S.Farm, selaku laboran yang telah banyak memberikan dukungan kepada penulis selama perjalanan di akademik,
5. Staff dosen, administrasi serta karyawan Sekolah Tinggi Farmasi Indonesia yang telah memberikan banyak kontribusi terhadap penyelesaian studi penulis,
6. Saint, Perth, Mew, Gulf, Jaemin, Jenso, Onew, Kai atas dukungan mental yang secara tidak langsung telah memberikan perhatian, semangat, inspirasi dan motivasi dalam pengerjaan penelitian dan penulisan ini. Terimakasih telah menjadi teman setia yang selalu menemani penulis dalam kondisi apapun,
7. Teman-teman seperjuangan angkatan 2021 terutama Genfa Iren Aldila, Rysma Nurmala Hidayat dan Sofy Firjatullah yang telah memberikan kenangan yang tak terlupakan,

8. Kepada teman-teman yang sangat berharga, Widya Islamyanti Asyifa, Putri Yasmin, Rima Tessa, Astri Rismawati, Assyaima, Nisa Nabila, Roni Pelaut, dan Mr. Lecture atas dukungan baik secara mental maupun moral, memberikan motivasi, semangat serta tak henti-hentinya serta mendengarkan keluh kesah penulis. Terimakasih telah membimbing penulis selama beberapa tahun terakhir sehingga penulis bisa tumbuh secara akademik maupun bukan hingga menjadi pribadi yang lebih baik,
9. Semua pihak yang telah berkontribusi yang tidak bisa dituliskan satu persatu.

Penulis menyadari bahwa dalam penyusunan skripsi ini masih terdapat kekurangan, baik dari segi isi maupun penyajian. Oleh karena itu, penulis sangat mengharapkan kritik dan saran yang membangun demi perbaikan di masa depan. Semoga skripsi ini dapat memberikan informasi yang bermanfaat bagi pembaca dan menjadi kontribusi kecil dalam pengembangan ilmu pengetahuan di bidang yang relevan.

Bandung, September 2025

Penulis

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN	i
KUTIPAN	ii
PERSEMBAHAN	iii
ABSTRAK	iv
<i>ABSTRACT</i>	v
KATA PENGANTAR.....	vi
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR TABEL.....	x
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR LAMPIRAN	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Identifikasi Masalah	2
1.3 Tujuan Penelitian.....	2
1.4 Kegunaan Penelitian.....	3
1.5 Waktu dan Tempat Penelitian.....	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Ayam Broiler (<i>Gallus gallus domesticus</i>)	4
2.2 Kurkumin	5
2.3 Mangostin.....	5
2.4 Piperin	6
2.5 Oxyresveratrol.....	7
2.6 Ethylisotiourea	7
2.7 Inflamasi.....	8
2.7.1 Inflamasi akut.....	9
2.7.2 Inflamasi kronis.....	9
2.8 iNOS dalam Inflamasi.....	9
2.9 Q90703.....	10
2.10 Penambatan Molekul dan Simulasi Dinamika Molekul.....	11
2.10.1 RMSD dan RMSF	14
2.10.2 Ikatan hidrogen.....	14

2.10.3	Kalkulasi energi ikatan metode MMGBSA	15
BAB III TATA KERJA		16
3.1	Alat.....	16
3.2	Bahan.....	16
3.3	Metode Penelitian.....	16
3.3.1	Penambatan molekul	16
3.3.2	Simulasi Dinamika Molekul	18
BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN		21
4.1	Molekuler <i>Docking</i>	21
4.1.1	Remodeling	21
4.1.2	Preparasi Struktur Ligan dan Reseptor	25
4.1.3	Penambatan Ulang Molekul (<i>Redocking</i>)	26
4.1.4	Penambatan Molekul (<i>Molecular Docking</i>).....	28
4.2	Dinamika Molekul	30
4.2.1	Preparasi	30
4.2.2	Produksi	32
4.2.3	Analisis Hasil MD.....	32
BAB V PENUTUP		38
5.1	Kesimpulan	38
5.2	Saran.....	38
DAFTAR PUSTAKA		39
LAMPIRAN		45

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1.2 RO5	26
Tabel 4.1.4.1 Visualisasi secara 2D dan 3D	29
Tabel 4.1.4.2 Hasil docking meliputi ΔG dan K_i	30
Tabel 4.2.3.2. 1 Ikatan hidrogen.....	35
Tabel 4.2.3.2. 2 Kalkulasi MMGBSA.....	37

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.2.1 Kurkumin	5
Gambar 2.3.1 Mangostin.....	6
Gambar 2.4.1 Piperin	6
Gambar 2.5.1 Oxyresveratrol.....	7
Gambar 2.6.1 Ethylisothiourea	8
Gambar 2.9.1 Q90703	11
Gambar 4.1 1.1 Sekuens Q90703 dan 4NOS	24
Gambar 4.1 3.1 Warna hijau menggambarkan hasil konformasi	27
Gambar 4.2.3.1.1 Grafik RMSD	33
Gambar 4.2.3.1.2 Grafik RMSF	34

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran	Halaman
1. Hasil Ramachandra Plot	45
2. Visualisasi Perbandingan <i>Redocking</i> dan 4NOS	46
3. Tabel <i>Binding Site</i> yang Terbentuk	47
4. Tabel Interaksi Ikatan Asam Amino yang Terbentuk.....	48
5. Perhitungan Koefisien Inhibisi	49
6. <i>Timestep</i> Setiap Ligan Hasil Dinamika Molekuler	51
7. Alur Kerja	52

DAFTAR PUSTAKA

- Adolfín Amalo, F. (2017). Identifikasi Daging Ayam Broiler Dengan Pengamatan Struktur Histologis Identification of Broiler Meat With Histological Methods. In *Jurnal Kajian Veteriner* (Vol. 5).
- Agu, P. C., Afiukwa, C. A., Orji, O. U., Ezech, E. M., Ofoke, I. H., Ogbu, C. O., Ugwuja, E. I., & Aja, P. M. (2023). Molecular docking as a tool for the discovery of molecular targets of nutraceuticals in diseases management. *Scientific Reports*, 13(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-023-40160-2>
- Agustina, F., & Ardiansyah, Z. A. (2020). Identifikasi Citra Daging Ayam Kampung dan Broiler Menggunakan Metode GLCM dan Klasifikasi-NN Image Identification of Local Chicken Meat and Broiler Chicken Meat Using GLCM Method and K-NN Classification. In 25 *JURNAL INFOKAM: Vol. XVI* (Issue 1).
- Basuki, S. A., & Melinda, N. (2017). *Prediksi Mekanisme Kerja Obat Terhadap Reseptornya Secara in Silico (Studi pada Antibiotika Sefotaksim)*. <http://sg.pdb.org>
- Bulusu, G., & Desiraju, G. R. (2020). Strong and Weak Hydrogen Bonds in Protein-Ligand Recognition. *Journal of the Indian Institute of Science*, Volume 100, 31–41.
- Chen, L., Deng, H., Cui, H., Fang, J., Zuo, Z., Deng, J., Li, Y., Wang, X., & Zhao, L. (2018). Inflammatory Responses and Inflammation-associated Diseases in Organs. *Oncotarget*, 9(6), 7204–7218. www.impactjournals.com/oncotarget/
- Chung, K.-O., Kim, B.-Y., Lee, M.-H., Kim, Y.-R., Chung, H.-Y., Park, J.-H., & Moon, J.-O. (2010). In-vitro and in-vivo anti-inflammatory effect of oxyresveratrol from *Morus alba* L. *Journal of Pharmacy and Pharmacology*, 55(12), 1695–1700. <https://doi.org/10.1211/0022357022313>
- Dewanto P, D., Kinanthi, P., Aqidatul K, N., Sistharani, N., & Yuniasih, D. (2021). Mini Review: The Potential of Piperine in Black Pepper in Improving Brain Work. *Ahmad Dahlan Medical Journal*, 2(2), 78–84. <http://http://journal2.uad.ac.id/index.php/admj78>
- Fadlan, A., & Nusantara, Y. R. (2021). The Effect of Energy Minimization on The Molecular Docking of Acetone-Based Oxindole Derivatives. *JKPK (Jurnal Kimia Dan Pendidikan Kimia)*, 6(1), 69. <https://doi.org/10.20961/jkpk.v6i1.45467>

- Farisi, S., & Musfiroh, I. (2015). Karakteristik Senyawa Inhibitor Yang Berpotensi Selektif Terhadap Reseptor Inducible Nitrat Oksida Sintase (iNOS): Review Jurnal. *Farmaka, Volume 15 Nomor 3*, 1–15.
- Frimayanti, N., Dona, R., & Cahyana, F. (2020). Simulasi Molecular Dynamic (MD) Senyawa Analog Kalkon Sebagai Inhibitor Untuk Sel Kanker Paru A549. *Jurnal Penelitian Farmasi Indonesia*, 9(2), 2020.
- Genheden, S., & Ryde, U. (2015). The MM/PBSA and MM/GBSA methods to estimate ligand-binding affinities. In *Expert Opinion on Drug Discovery* (Vol. 10, Issue 5, pp. 449–461). Informa Healthcare. <https://doi.org/10.1517/17460441.2015.1032936>
- Germolec, D. R., Shipkowski, K. A., Frawley, R. P., & Evans, E. (2018). Markers of inflammation. In *Methods in Molecular Biology* (Vol. 1803, pp. 57–79). Humana Press Inc. https://doi.org/10.1007/978-1-4939-8549-4_5
- Hanif, A. U., Lukis, P. A., & Fadlan, A. (2020). Pengaruh Minimisasi Energi MMFF94 dengan MarvinSketch dan Open Babel PyRx pada Penambatan Molekuler Turunan Oksindola Tersubstitusi. *ALCHEMY*, 8(2), 33–40. <https://doi.org/10.18860/al.v8i2.10481>
- Harahap, M. A. Y., Damayanti, C. A., Wibowo, S., Natsir, M. H., & Sjoftan, O. (2023). *Anti-Inflammatory Potential of Selected Indonesian Phytogetic Blends to Nitric Oxide Synthase – Inducible Protein in Mojosari Ducks (Anas javanica): In-silico Study*. <https://doi.org/10.1101/2023.04.26.538405>
- Harlim, A. (2018). *Buku Ajar Ilmu Kesehatan Kulit dan Kelamin Immunologi Inflamasi*. FK UKI.
- Herawati, H., Oktanella, Y., & Anisa, A. K. (2021). Molecular Docking Analysis of Curcuminoids from Curcuma longa Extract on iNOS as an Immunomodulator Candidate in Broilers. *Advances in Animal and Veterinary Sciences*, 9(4), 519–524. <https://doi.org/10.17582/journal.aavs/2021/9.4.519.524>
- Hikmawanti, P. E., Aulia, C., Putri Viransa Jurusan Farmasi, V., Farmasi dan Sains, F., & Muhammadiyah Hamka, U. (2016). Kandungan Piperin Dalam Ekstrak Buah Lada Hitam dan Buah Lada Putih (Piper nigrum L.) yang Diekstraksi Dengan Variasi Konsentrasi Etanol Menggunakan Metode KLT-Densitometri. *Media Farmasi*, 13(2), 173–185.
- Hollingsworth, S. A., & Dror, R. O. (2018). Molecular Dynamics Simulation for All. In *Neuron* (Vol. 99, Issue 6, pp. 1129–1143). Cell Press. <https://doi.org/10.1016/j.neuron.2018.08.011>

- Irawan, A. (2025). *Komposisi Mikrobiota Saluran Pencernaan Ayam Broiler: dinamika dan upaya optimalisasinya*. <https://www.researchgate.net/publication/388451558>
- 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). *In Silico Study of Licorice (Glycyrrhiza glabra L.) on VEGFR-2 Receptor in Breast Cancer*. <https://jurnal.unpad.ac.id/ijbp>
- Listyasari; Nadiya, Soeharsono, & Purnama; Muhammad Thohawi Eziyad. (2022). Peningkatan Bobot Badan, Konsumsi dan Konversi Pakan dengan Pengaturan Komposisi Seksing Ayam Broiler Jantan dan Betina. *Acta Veterinaria Indonesiana, Vol. 10, No 3*.
- Liu, J., Zhu, T., Wang, X., He, X., & Zhang, J. Z. H. (2015). Quantum Fragment Based ab Initio Molecular Dynamics for Proteins. *Journal of Chemical Theory and Computation, 11*(12), 5897–5905. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00558>
- Mierza, V., Sakinah, I. V., Mutiara Iskandar, P., Irwansyah, S. L., Aisiyah, A., & Nailuvar, R. (2022). Studi Literatur : Standarisasi Senyawa Alfa Mangostin. *PharmaCine*. <https://journal.unsika.ac.id/>
- Minhas, R., Bansal, Y., & Bansal, G. (2020). Inducible nitric oxide synthase inhibitors: A comprehensive update. In *Medicinal Research Reviews* (Vol. 40, Issue 3, pp. 823–855). John Wiley and Sons Inc. <https://doi.org/10.1002/med.21636>
- Mohan, S., Syam, S., Abdelwahab, S. I., & Thangavel, N. (2018). An Anti-Inflammatory Molecular Mechanism Of Action Of α -mangostin, The Major Xanthone From The Pericarp Of Garcinia Mangostana: An In Silico, In Vitro And In Vivo Approach. *Food and Function, 9*(7), 3860–3871. <https://doi.org/10.1039/c8fo00439k>
- Muhammed, M. T., & Aki-Yalcin, E. (2019). Homology modeling in drug discovery: Overview, current applications, and future perspectives. In *Chemical Biology and Drug Design* (Vol. 93, Issue 1, pp. 12–20). Blackwell Publishing Ltd. <https://doi.org/10.1111/cbdd.13388>
- Müllebnner, A., Dorighello, G. G., Kozlov, A. V., & Duvigneau, J. C. (2017). Interaction between mitochondrial reactive oxygen species, heme oxygenase, and nitric oxide synthase stimulates phagocytosis in macrophages. *Frontiers in Medicine, 4*(JAN). <https://doi.org/10.3389/fmed.2017.00252>

- Mutiah, R. (2015). Evidence Based Kurkumin Dari Tanaman Kunyit (*Curcuma longa*) Sebagai Terapi Kanker Pada Pengobatan Modern. *Jural Farma Sains*, Vol. 1, 28–41.
- Muttaqin, F. Z., Ferdian Pratama, M., Kurniawan, F., Tinggi, S., & Bandunng, F. (2019). Molecular Docking And Molecular Dynamic Studies Of Stilbene Derivate Compounds As Sirtuin-3 (SIRT3) Histone Deacetylase Inhibitor On Melanoma Skin Cancer And Their Toxicities Prediction. In *Molecular Docking ... Journal of Pharmacopolium* (Vol. 2, Issue 2).
- Naqvi, A. A. T., Mohammad, T., Hasan, G. M., & Hassan, Md. I. (2019). Advancements in Docking and Molecular Dynamics Simulations Towards Ligand-receptor Interactions and Structure-function Relationships. *Current Topics in Medicinal Chemistry*, 18(20), 1755–1768. <https://doi.org/10.2174/1568026618666181025114157>
- Nasser, G. A. (2020). Kunyit Sebagai Agen Anti Inflamasi. *Wellness And Healthy Magazine*, 2(1), 147–158.
- Pandey, A. K., & Verma, S. (2022). An in-silico evaluation of dietary components for structural inhibition of SARS-Cov-2 main protease. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, 40(1), 136–142. <https://doi.org/10.1080/07391102.2020.1809522>
- Pratama, A. A., Rifai, Y., & Marzuki, A. (2017). Docking Molekuler Senyawa 5,5'-Dibromometilsesamin. *Original Article MFF*, 21(3), 67–69. <https://doi.org/10.20956/mff.v>
- Pratiwi, S. W., Anggraeni, A., & Bahti, H. H. (2022). Karakterisasi Hasil Reaksi Ion Gadolinium (III) dengan Ligan Dibutilditiokarbamat Menggunakan Metode Mekanika Molekuler (MM2). *Chimica et Natura Acta*, 10(2), 66–71. <https://doi.org/10.24198/cna.v10.n2.19139>
- Rahmi, Sharlini Desfika Nasution, & Yulia Fauziyah. (2023). Peran Nitrit Oksida Terhadap Tekanan Darah. *Jurnal Medika Malahayati*, Vol. 7, 997–1007.
- Ramadhani, N., Adi Sumiwi, S., Raya Bandung Sumedang Km, J., & Kode Pos, J. (2016). *Aktivitas Antiinflamasi Berbagai Tanaman Diduga Berasal Dari Flavanoid*.
- Rena, S. R., Nurhidayah, N., & Rustan, R. (2022). Analisis Molecular Docking Senyawa Garcinia Mangostana L Sebagai Kandidat Anti SARS-CoV-2. *Jurnal Fisika Unand*, 11(1), 82–88. <https://doi.org/10.25077/jfu.11.1.82-88.2022>
- Rubiyanti, R., Susilawati, Y., Muchtaridi, M., Kunci, K., buah manggis, K., mangostana, G. L., & mangostin, A. (2017). Review Artikel Potensi Ekonomi

Dan Manfaat Kandungan Alfa-Mangostin Serta Gartain Dalam Kulit Buah Manggis. *Farmaka*, 15, 15–25.

- Rusdin, A. (2019). α -Mangostin dari Buah Manggis, Kandidat Obat Antikanker Baru. *Farmasetika.Com* (Online), 3(2). <https://doi.org/10.24198/farmasetika.v4i2.22533>
- Santos, L. H. S., Ferreira, R. S., & Caffarena, E. R. (2019). Integrating molecular docking and molecular dynamics simulations. In *Methods in Molecular Biology* (Vol. 2053, pp. 13–34). Humana Press Inc. https://doi.org/10.1007/978-1-4939-9752-7_2
- Shitova, A. A., Filimonova, M. V, Soldatova, O. V, Volkova, I. K., Rybachuk, V. A., Shevchenko, L. I., Surinova, V. I., Kaprin, A. D., Shegay, P. V, Ivanov, S. A., Shlyakhto, E. V, & Filimonov, A. S. (2024). In Vitro and In Vivo Antitumor Activities of Isothiourea and Cinnamic Acid Derivative with NOS/MCT Inhibitory Effect. *Bulletin of Experimental Biology and Medicine*, 178(1), 68–74. <https://doi.org/10.1007/s10517-024-06284-9>
- Song, X., Bao, L., Feng, C., Huang, Q., Zhang, F., Gao, X., & Han, R. (2024). Accurate Prediction of Protein Structural Flexibility by Deep Learning Integrating Intricate Atomic Structures and Cryo-EM Density Information. *Nature Communications*, 15(1). <https://doi.org/10.1038/s41467-024-49858-x>
- Umam, M. K., Prayogi, H. S., Nurgiartiningsih, V. M. A., Setyo Prayogi, H., & Nurgiartiningsih, D. V. M. A. (2015). *Penampilan Produksi Ayam Pedaging Yang Dipelihara Pada Sistem Lantai Kandang Panggung dan Kandang Bertingkat*. <http://jiip.ub.ac.id/>
- Unke, O. T., & Meuwly, M. (2019). PhysNet: A Neural Network for Predicting Energies, Forces, Dipole Moments, and Partial Charges. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 15(6), 3678–3693. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.9b00181>
- Yang, D., Kuang, L., & Hu, A. (2025). Edge-enhanced interaction graph network for protein-ligand binding affinity prediction. *PLoS ONE*, 20(4 April). <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0320465>
- Yazid, H. Y., Sjamsudin, E., Yuza, A. T., Maulina, T., Mulut, D. B., Maksilofasial, D., & Gigi, K. (2023). Efektivitas Penggunaan Kurkumin Terhadap Peningkatan Sistem Imun Tubuh. *Jurnal Aplikasi Ipteks Untuk Masyarakat*, 12(1), 40–45.
- Young, L., & Villa, E. (2023). *Annual Review of Biophysics Bringing Structure to Cell Biology with Cryo-Electron Tomography*. <https://doi.org/10.1146/annurev-biophys-111622>

- Zhang, X., Akhtar, M., Chen, Y., Ma, Z., Liang, Y., Shi, D., Cheng, R., Cui, L., Hu, Y., Nafady, A. A., Ansari, A. R., Abdel-Kafy, E. S. M., & Liu, H. (2022). Chicken jejunal microbiota improves growth performance by mitigating intestinal inflammation. *Microbiome*, *10*(1). <https://doi.org/10.1186/s40168-022-01299-8>
- Zikri, A. T., Pranowo, H. D., & Haryadi, W. (2021). Stability, hydrogen bond occupancy analysis and binding free energy calculation from flavonol docked in DAPK1 active site using molecular dynamic simulation approaches. *Indonesian Journal of Chemistry*, *21*(2), 383–390. <https://doi.org/10.22146/ijc.56087>