

**EKSPLORASI MEKANISME MOLEKULER *Solanum nigrum*
TERHADAP JALUR LAKTASI BERBASIS *NETWORK*
PHARMACOLOGY DAN *MOLECULAR DOCKING***

SKRIPSI



Oleh:

HUTOMO MANDALA PUTRA

NIM: 2204101016

**PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS ILMU KESEHATAN DAN SAINS
UNIVERSITAS PGRI MADIUN
Juli 2026**

**EKSPLORASI MEKANISME MOLEKULER *Solanum nigrum*
TERHADAP JALUR LAKTASI BERBASIS *NETWORK*
PHARMACOLOGY DAN *MOLECULAR DOCKING***

SKRIPSI

Diajukan kepada Universitas PGRI Madiun untuk Memenuhi Salah Satu
Persyaratan dalam Menyelesaikan Skripsi

Oleh:

HUTOMO MANDALA PUTRA

NIM. 2204101016

**PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS ILMU KESEHATAN DAN SAINS
UNIVERSITAS PGRI MADIUN
Juli 2026**

LEMBAR PERSETUJUAN DOSEN PEMBIMBING

Skripsi oleh Hutomo Mandala Putra telah diperiksa dan disetujui untuk diuji

Madiun, 6 Juli 2026

Pembimbing 1,



Apt. Weka Sidha Bhagawan M. Farm

NIDN. 2024118801

Madiun, 6 Juli 2026

Pembimbing II,



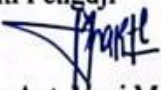
Dra. Arum Suproborini, M. Si

NIDN. 0721066703

LEMBAR PENGESAHAN PANITIA PENGUJI

Skripsi oleh Hutomo Mandala Putra telah dipertahankan di depan dosen penguji pada hari Jum'at, 24 Juli 2026.

Tim Penguji


Dr. Apt. Vevi Maritha., M. Farm.

Ketua

NIDN. 0703128604


Dra. Arum Suproborini, M. Si

Sekretaris

NIDN. 0721066703


apt. Weka Sidha Bhagawan, M.Farm.

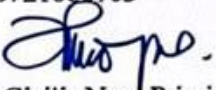
Anggota

NIDN. 2024118801


Dra. Arum Suproborini, M. Si

Anggota

NIDN. 0721066703


Dr. drh. Cicilia Novi Primiani, M.Pd.

Anggota

NIDN. 0727116903

Mengetahui,

Dekan FIKS,




Apt. Weka Sidha Bhagawan M. Farm

NIDN. 2024118801

Mengesahkan,

Kaprodi Farmasi




Dr. apt. Vevi Maritha, M. Farm

NIDN. 0703128604

PERNYATAAN KEASLIAN KARYA ILMIAH SKRIPSI

Yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Hutomo Mandala Putra

NIM : 2204101016

Program Studi : Farmasi

Fakultas : Ilmu Kesehatan dan Sains

Menyatakan dengan sebenarnya, bahwa skripsi yang saya tulis dengan judul “Eksplorasi Mekanisme Molekuler *Solanum nigrum* Terhadap Jalur Laktasi Berbasis *Network Pharmacology* Dan *Molecular Docking*” ini benar-benar merupakan hasil karya sendiri, bukan merupakan pengambilalihan tulisan atau pikiran orang lain yang saya akui sebagai hasil tulisan atau pikiran saya sendiri. Apabila di kemudian hari terbukti atau dapat dibuktikan skripsi ini plagiat, maka saya menerima sanksi atas perbuatan saya tersebut.

Madiun, 24 Juli 2026

Yang membuat pernyataan,

A handwritten signature in black ink is written over a yellow and green 10,000 Rupiah postage stamp. The stamp features the Garuda Pancasila emblem and the text 'METRAI TEMPEL' and 'R8DE0A0X125204615'.

Hutomo Mandala Putra

NIM. 2204101016

PERSEMBAHAN

Untuk Tuhan Yang Maha Esa, yang kebaikan dan penyertaan-Nya melampaui segala keterbatasan serta keraguan yang sempat singgah di kepala.

Untuk Kedua Orang Tua, penunjuk arah terbaik dalam hidup. Lembar-lembar skripsi ini adalah persembahan kecil atas pengorbanan besar yang tidak akan pernah mampu terbayar tuntas. Terima kasih telah menjadi alasan utama untuk pulang membawa kebanggaan. Untuk Keluarga dan Sahabat, yang senantiasa hadir membawa hangatnya doa, dukungan moral, dan kepercayaan di saat-saat paling riuh maupun sepi.

Untuk yang selalu ada, terima kasih telah menjadi ruang aman yang menenangkan, memberikan dukungan tanpa syarat dalam segala keterbatasan, dan bersedia berjalan beriringan melewati proses panjang ini.

Untuk diri sendiri, yang dipaksa tumbuh dan dewasa oleh jarak. Terima kasih karena telah memilih bertahan dari rasa asing, ketakutan, dan kesendirian di tanah rantau. Perjalanan empat tahun ini adalah saksi bisu atas ketangguhan untuk menyelesaikan apa yang telah dimulai dengan kepala tegak.

Sebab pada akhirnya, keberhasilan ini bukanlah pencapaian tunggal. Ia adalah akumulasi dari privilese berupa kesempatan, doa-doa yang tulus, dan pengorbanan senyap dari orang-orang tercinta yang melapangkan jalan ini.

MOTTO

“Masa depan kadang menakutkan, Penuh dengan ketidakpastian, Lebih mudah
jika tak dipikirkan”

- The Adams -

Hidup yang berarti, Bukan sekedar tak mati,
Mati yang berarti, Mesti yang terakhir kali”

- FSTVLST -

“Jika nasi sudah menjadi bubur, maka tambahkanlah ayam suwir. Fokuslah pada
solusi, bukan menyesali apa yang terjadi”

KATA PENGANTAR

Penulis memanjatkan puji syukur ke hadirat Tuhan Yang Maha Esa atas rahmat dan karunia-Nya sehingga skripsi berjudul “Eksplorasi Mekanisme Molekuler *Solanum nigrum* terhadap Jalur Laktasi Berbasis *Network Pharmacology* dan *Molecular Docking*” dapat diselesaikan.

Penyusunan skripsi ini terlaksana dengan bantuan, bimbingan, dan dukungan dari berbagai pihak. Penulis menyampaikan penghargaan dan terima kasih kepada:

1. Dr. H. Supri Wahyudi Utomo, M.Pd., selaku Rektor Universitas PGRI Madiun.
2. apt. Weka Sidha Bhagawan, M. Farm., selaku Dekan FIKS Universitas PGRI Madiun serta Dosen Pembimbing I penulis, yang telah memberikan kebijakan, arahan, saran, dukungan penuh, serta meluangkan banyak waktu, tenaga, dan pikiran untuk membimbing penulis sehingga skripsi ini dapat terselesaikan dengan baik.
3. Dr. apt. Vevi Maritha, M. Farm., selaku Kepala Program Studi Farmasi Universitas PGRI Madiun yang telah senantiasa memberikan dukungan, motivasi, serta arahan yang sangat berarti bagi penulis selama masa perkuliahan.
4. Dra. Arum Suproborini, M. Si., selaku Dosen Pembimbing II penulis, yang telah memberikan banyak saran, kritik konstruktif, bimbingan, kebaikan, dan dukungan tanpa henti selama proses penelitian berjalan.
5. Seluruh dosen Program Studi Farmasi yang telah membekali penulis dengan ilmu dan pengetahuan selama menempuh pendidikan.

6. Kedua orang tua kandung penulis, Bapak R. Harjito Hady Purnomo dan Ibu Rina, yang senantiasa memberikan doa, harapan, dan kasih sayang. Terima kasih atas kehidupan dan jalan yang telah diberikan kepada penulis. Semoga pencapaian ini dapat menjadi wujud bakti dan salah satu bentuk kebanggaan untuk beliau berdua.
7. Bapak Hufron Suhada S.T., Ibu Erny Poernomo Wati, dan Ibu Susi Poernomo Wati, sosok-sosok pelindung dan penolong yang selalu merangkul, membimbing, dan membesarkan hati penulis dalam melewati masa-masa paling sulit. Terima kasih tak terhingga atas pengorbanan, kebaikan, dan uluran tangan yang selalu ada ketika penulis merasa kehilangan arah.
8. Ibu Nurmiyati, S.E., M.M., selama masa perkuliahan yang telah memberikan banyak pandangan, nasihat, dukungan, dan perhatian yang tulus kepada penulis.
9. Adik perempuan penulis, Zerlina Aurora Putri, yang selalu menjadi alasan dan motivasi penulis untuk terus memberikan contoh yang baik. Terima kasih atas semangat yang senantiasa menguatkan selama proses penyusunan skripsi ini.
10. Bapak Mayor Jenderal TNI (Purn) alm. Haji Muhammad Jacob Dasto beserta almh. Ibu Hajjah Endang Susilowati, Bapak Haji Herahmat Bahagianto beserta Ibu Hajjah Dewi Kartika Ningrum dan seluruh keluarga besar beliau.
11. Bapak Marsekal Madya TNI (Purn) Wresniwiro beserta Ibu dan seluruh keluarga besar beliau, Bapak Letnan Kolonel Boma Hasmoro beserta Ibu dan seluruh keluarga besar beliau.
12. Bapak Jufri Ramadhan Sinurat, Bapak Ria Patar Carnegie, Bapak Kasepto Citlian, PT Gema Meraki Sukses serta Pegasus Grup.

13. Seseorang yang istimewa dihati penulis, yang selalu setia mendampingi, menjadi pendengar yang baik untuk setiap keluhan, serta senantiasa memberikan semangat juang dan dukungan emosional. Terima kasih telah menjadi ruang aman bagi penulis hingga skripsi ini dapat diselesaikan.
14. Sahabat-sahabat seperjuangan, keluarga kecil "Suka Bapak", 7 bersaudara laki-laki hebat yang mewarnai masa perkuliahan penulis. Terima kasih atas tawa, kebersamaan yang tak tergantikan, solidaritas yang kuat, dan segala cerita gila yang membuat beban kuliah terasa jauh lebih ringan.
15. Seluruh teman-teman mahasiswa Program Studi Farmasi yang telah bersama-sama menemani dan saling bahu-membahu selama masa perkuliahan. Terima kasih atas segala kenangan yang menjadi bagian dari perjalanan ini.

Dan pada akhir kata, untuk diri saya sendiri, Hutomo Mandala Putra, terima kasih karena telah bertahan hingga hari ini. Terima kasih karena menolak untuk hancur oleh keadaan, tetap memilih melangkah di perantauan, dan berhasil membuktikan bahwa dari situasi keluarga yang tidak sempurna, tetap bisa lahir sebuah pencapaian yang membanggakan. Pencapaian ini mungkin terlihat sederhana bagi orang lain, tetapi bagi diri ini, ini adalah bukti nyata dari keberanian dan ketangguhan untuk terus melanjutkan perjalanan ketika menyerah terasa jauh lebih mudah.

Madiun, 17 Juli 2026

Penulis

DAFTAR ISI

LEMBAR PERSETUJUAN DOSEN PEMBIMBING	iii
LEMBAR PENGESAHAN PANITIA PENGUJI	iv
PERNYATAAN KEASLIAN KARYA ILMIAH SKRIPSI	v
PERSEMBAHAN	vi
MOTTO	vii
KATA PENGANTAR	viii
DAFTAR ISI	xi
DAFTAR TABEL	xiv
DAFTAR GAMBAR	xv
DAFTAR LAMPIRAN	xvi
ABSTRAK	xvii
ABSTRACT	xviii
BAB I	1
PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Batasan Masalah	5
C. Rumusan Masalah	5
D. Tujuan Penelitian	6
E. Manfaat Penelitian	6
BAB II	8
KAJIAN PUSTAKA	8
A. Kajian Pustaka	8
B. Kerangka Konseptual	13
BAB III	15
METODE PENELITIAN	15
A. Tempat dan Waktu Penelitian	15
B. Jenis Penelitian	15
C. Populasi, Sampel dan Teknik Pengambilan Sampel	16
1. Populasi	16
2. Sampel	16
3. Teknik Pengambilan Sampel	16
D. Variabel Penelitian dan Variabel Operasional	17

1. Variabel Independen (Variabel Bebas)	17
2. Variabel Dependen (Variabel Terikat).....	17
3. Variabel Kontrol (untuk menjaga validitas internal)	17
4. Definisi Operasional Variabel dan Indikator	18
E. Teknik Pengumpulan Data	19
1. Profiling Metabolit dan Penapisan Senyawa (In silico).....	19
2. Prediksi Bioaktivitas, ADMET, dan Toksisitas	19
3. Analisis Network pharmacology.....	20
4. Simulasi <i>Molecular Docking</i>	21
F. Instrumen Penelitian.....	21
1. Alat.....	21
2. Bahan	22
G. Teknik Analisis Data	23
BAB IV	24
HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	24
A. Deskripsi Data.....	24
1. <i>Metabolit Profiling</i> Ekstrak Daun Ranti (<i>Solanum nigrum</i>) Berdasarkan LC-HRMS	24
2. Profil Metabolit dan Seleksi Senyawa Kandidat	58
3. Prediksi Bioaktivitas, Toksisitas, dan <i>Drug-Likeness</i>	61
4. Analisis Network Pharmacology	63
5. Hasil Simulasi <i>Molecular Docking</i>	66
B. Hasil Pengujian Rumusan Masalah	75
1. Profil Senyawa Fitokimia Ekstrak Daun Ranti (<i>Solanum nigrum</i>) Berdasarkan Analisis LC-HRMS	75
2. Mekanisme Kerja Senyawa Fitokimia <i>Solanum nigrum</i> terhadap Target Molekuler Aktivitas Laktogenik Berdasarkan <i>Network Pharmacology</i>	77
3. Interaksi Senyawa Fitokimia <i>Solanum nigrum</i> dengan Protein Target Aktivitas Laktogenik Melalui Simulasi <i>Molecular Docking</i>	78
C. Pembahasan.....	80
1. Profil Metabolit Ekstrak Daun Ranti (<i>Solanum nigrum</i>) Berdasarkan LC-HRMS.....	80
2. Profil Metabolit dan Seleksi Senyawa Kandidat	83
3. Prediksi Bioaktivitas, Toksisitas, dan <i>Drug-Likeness</i>	86
4. Analisis <i>Network Pharmacology</i>	90

5. Hasil <i>Molecular Docking</i>	95
BAB V	111
KESIMPULAN DAN SARAN.....	111
A. Kesimpulan	111
B. Saran	112
DAFTAR PUSTAKA	113
LAMPIRAN.....	127
RIWAYAT HIDUP	156

DAFTAR TABEL

Tabel 3.1 Tabel Definisi Operasional Variabel	18
Tabel 4.1 Profil Metabolit Daun Ranti (<i>Solanum nigrum</i>) Menggunakan LC-HRMS	25
Tabel 4.2 Senyawa Hasil Identifikasi LC-HRMS pada Ekstrak <i>Solanum nigrum</i>	58
Tabel 4.3 Daftar 6 Senyawa Kandidat Laktogenik Ekstrak <i>Solanum nigrum</i>	59
Tabel 4.4 Visualisasi 6 Senyawa Kandidat Laktogenik Ekstrak <i>Solanum nigrum</i>	60
Tabel 4.5 Skor Pa (Probability to be Active) Senyawa Kandidat.	61
Tabel 4.6 Toxicity Model Computation Analisis	62
Tabel 4.7 Drug-likeness	62
Tabel 4.8 Hasil Binding Affinity Senyawa Kandidat terhadap Reseptor Target	66
Tabel 4.9 Visualisasi 2D EGFR	67
Tabel 4.10 Interaksi Residu pada Reseptor EGFR (1M17)	68
Tabel 4.11 Visualisasi 2D ESR1	69
Tabel 4.12 Interaksi Residu pada Reseptor ESR1 (1XP1)	70
Tabel 4.13 Visualisasi 2D JAK2	71
Tabel 4.14 Interaksi Residu pada Reseptor JAK2 (7RN6)	71
Tabel 4.15 Visualisasi 2D PGR	73
Tabel 4.16 Interaksi Residu pada Reseptor PGR (1SR7)	74
Tabel 4.17 Profil Metabolit Kandidat Laktogenik Ekstrak <i>Solanum nigrum</i>	76
Tabel 4.18 Profil Protein Target Berdasarkan Analisis Network Pharmacology	77
Tabel 4.19 Rangkuman Perbandingan Afinitas Ikatan dan Kesamaan Residu Isorhamnetin-3-O-glucoside terhadap Reseptor Target	79

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Tanaman Ranti (<i>Solanum nigrum</i>)	9
Gambar 2.2 Kerangka Konseptual Penelitian	13
Gambar 4.1 Irisan Senyawa Diagram Venn	63
Gambar 4.2 Protein-Protein Interaction (PPI).....	64
Gambar 4.3 Estrogen Signaling Pathway dan Prolactin Signaling Pathway	66

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Jadwal Kegiatan	127
Lampiran 2 Visualisasi Discovery Studio 2D Ligan dengan Reseptor EGFR	128
Lampiran 3 Visualisasi Discovery Studio 2D Ligan dengan Reseptor ESR1	131
Lampiran 4 Visualisasi Discovery Studio 2D Ligan dengan Reseptor JAK2	134
Lampiran 5 Visualisasi Discovery Studio 2D Ligan dengan Reseptor PGR	137
Lampiran 6 Hasil PCA	140
Lampiran 7 Validasi Sumber Pustaka	142