

**PROFIL SENYAWA DAN PREDIKSI MEKANISME LAKTASI
EKSTRAK HERBA TIREM (*Jacquemontia paniculata*) :
“PENDEKATAN METABOLIT *SECARA IN SILICO*”**

PENELITIAN



Oleh:

ACHMAD RIDWAN

NIM: 2204101007

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

**PROFIL SENYAWA DAN PREDIKSI MEKANISME LAKTASI
EKSTRAK HERBA TIREM (*Jacquemontia paniculata*) :
“PENDEKATAN METABOLIT *SECARA IN SILICO*”**

SKRIPSI

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

Oleh :

ACHMAD RIDWAN

NIM. 2204101007

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

LEMBAR PERSETUJUAN DOSEN PEMBIMBING

Skripsi oleh Achmad Ridwan telah
diperiksa dan disetujui untuk diuji

Madiun, 15 July 2026

Pembimbing 1,



Apt. Weka Sidha Bhagawan M. Farm

NIDN. 2024118801

Pembimbing II,



Dra. Arum Suproborini, M. Si

NIDN. 0721066703

LEMBAR PENGESAHAN DOSEN PENGUJI

Skripsi oleh Achmad Ridwan telah dipertahankan di depan Dosen Penguji pada Hari Jumat Tanggal 17 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



Puri Ratna Kartini, S. KM., M. Epid

Anggota

NIDN. 0721048505



Mengetahui,
Dekan FIKS

apt. Weka Sidha Bhagawan, M. Farm
NIDN. 2024118801



Mengesahkan,
Kepala Program Studi Farmasi

Dr. apt. Vevi Maritha, M. Farm
NIDN. 0703128604

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN KARYA ILMIAH SKRIPSI

Yang bertandatangan di bawah ini :

Nama : Achmad Ridwan
NIM : 2204101007
Program Studi : Farmasi
Fakultas : Ilmu Kesehatan dan Sains

Menyatakan dengan sebenarnya, bahwa Skripsi yang Saya tulis dengan Judul “Profil Senyawa Dan Prediksi Mekanisme Laktasi Ekstrak Herba Tirem (*Jacquemontia paniculata*) : “Pendekatan Metabolit *Secara In silico*” ini benar-benar merupakan hasil karya saya 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 bersedia menerima sanksi atas perbuatan tersebut.

Madiun, 15 Juli 2026

Yang membuat pernyataan



The signature is written in black ink over a red circular stamp and a yellow rectangular stamp. The red stamp contains the text 'METERAI TEMPEL' and the yellow stamp contains the text '226AOX012394069'.

Achmad Ridwan

NIM. 2204101007

MOTTO

*"Time grabs you by the wrist, directs you where to go
So make the best of this test, and don't ask why
It's not a question, but a lesson learned in time
It's something unpredictable
But in the end, it's right
I hope you had the time of your life."*

-Green Day (Good Riddance)

"If you never try, you'll never know"

-Coldplay (Fix You)

"Forget the past, enjoy the moment, trust the future"

-Achmad Ridwan

PERSEMBAHAN

Dengan penuh rasa syukur kepada Tuhan Yang Maha Esa, karya sederhana ini kupersembahkan kepada:

Kedua orang tuaku tercinta, terima kasih atas setiap doa yang tak pernah putus, kasih sayang yang tak terbatas, serta segala pengorbanan yang telah mengantarkanku hingga berada di titik ini. Semoga setiap langkah dan pencapaianku menjadi kebahagiaan serta kebanggaan untuk kalian.

Terima kasih untuk diriku sendiri karena tidak selalu kuat, tetapi selalu memilih untuk kembali berdiri. Terima kasih telah bertahan pada hari-hari ketika tidak ada yang benar-benar mengerti lelahmu, ketika ragu lebih nyaring daripada yakin, dan ketika menyerah terasa jauh lebih mudah daripada melangkah.

Karya ini bukan bukti bahwa kamu tidak pernah gagal. Justru sebaliknya, ini adalah kumpulan dari setiap kegagalan yang tidak berhasil menghentikanmu. Simpanlah lembar terakhir ini sebagai pengingat: suatu hari nanti, ketika hidup kembali terasa berat, pernah ada versi dirimu yang berhasil melewati semuanya dan versi itu adalah kamu.

KATA PENGANTAR

Puji syukur Penulis panjatkan ke hadirat Tuhan Yang Maha Esa atas segala rahmat, karunia, dan penyertaan-Nya sehingga Penulis dapat menyelesaikan skripsi ini dengan baik. Skripsi ini disusun sebagai salah satu persyaratan untuk memperoleh gelar Sarjana Farmasi (S.Farm.) pada Program Studi Farmasi, Fakultas Ilmu Kesehatan dan Sains, Universitas PGRI Madiun. Skripsi ini berjudul “Profil Senyawa dan Prediksi Mekanisme Laktasi Ekstrak Herba Tirem (*Jacquemontia paniculata*): Pendekatan Metabolit Secara *In silico*.”

Penyusunan skripsi ini tidak terlepas dari bimbingan, bantuan, dukungan, serta doa dari berbagai pihak. Oleh karena itu, pada kesempatan ini Penulis dengan penuh rasa hormat dan ketulusan hati menyampaikan ucapan terima kasih kepada:

1. Bapak Dr. H. Supri Wahyudi Utomo selaku Rektor Universitas PGRI Madiun.
2. Bapak apt. Weka Sidha Bhagawan, M.Farm., selaku Dekan Fakultas Ilmu Kesehatan dan Sains Universitas PGRI Madiun sekaligus Dosen Pembimbing I yang telah meluangkan waktu, memberikan bimbingan, arahan, motivasi, serta berbagai masukan ilmiah dengan penuh kesabaran sehingga Penulis dapat menyelesaikan skripsi ini dengan baik.
3. Ibu Dra. Arum Suproborini, M. Si, selaku Dosen Pembimbing 2 yang telah meluangkan waktu, memberikan bimbingan, arahan, motivasi, serta berbagai masukan ilmiah dengan penuh kesabaran sehingga Penulis dapat menyelesaikan skripsi ini dengan baik.
4. Seluruh dosen Program Studi Farmasi Fakultas Ilmu Kesehatan dan Sains Universitas PGRI Madiun yang telah memberikan ilmu pengetahuan,

pengalaman, serta wawasan yang sangat bermanfaat selama masa perkuliahan.

5. Bapak Sidiq dan Ibu Asmirah selaku kedua orang tua saya, yang senantiasa memberikan kasih sayang, doa, nasihat, dukungan, serta semangat kepada Penulis dalam setiap langkah kehidupan. Terima kasih atas segala pengorbanan, kerja keras, dan ketulusan yang telah diberikan demi masa depan Penulis. Semoga Allah SWT senantiasa melimpahkan kesehatan, kebahagiaan, serta keberkahan kepada Bapak.
6. Keluarga kecil Suka Bapak, tujuh saudara tanpa ikatan darah yang selalu memberikan semangat, kebersamaan, canda tawa, serta dukungan selama perjalanan perkuliahan. Terima kasih telah menjadi bagian dari perjalanan hidup Penulis dan membuktikan bahwa keluarga dapat terjalin melalui rasa saling peduli, menghargai, dan memiliki.
7. Teman-teman seperjuangan Program Studi Farmasi, khususnya Angkatan 2022, yang telah memberikan semangat, bantuan, kebersamaan, serta motivasi selama menempuh pendidikan hingga penyusunan skripsi ini.
8. Terakhir, terima kasih kepada diri sendiri yang telah bertahan, berjuang, dan tidak menyerah hingga mampu menyelesaikan skripsi ini. Terima kasih karena tetap kuat melewati setiap tantangan, rasa lelah, dan keraguan dalam setiap prosesnya. Semoga pencapaian ini menjadi bukti bahwa setiap doa, usaha, dan kesabaran tidak pernah sia-sia, serta menjadi awal untuk terus berkembang dan meraih impian di masa depan.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih memiliki berbagai

keterbatasan dan jauh dari kata sempurna. Oleh karena itu, Penulis mengharapkan kritik dan saran yang bersifat membangun demi penyempurnaan karya ini. Semoga skripsi ini dapat memberikan manfaat serta menjadi tambahan referensi bagi pengembangan ilmu pengetahuan, khususnya di bidang farmasi.

Akhir kata, Penulis menyadari bahwa Skripsi ini masih jauh dari kata sempurna. Oleh karena itu, saran dan kritik yang membangun sangat Penulis harapkan untuk perbaikan di masa yang akan datang.

Madiun, 15 Juli 2026

Penulis

DAFTAR ISI

LEMBAR PERSETUJUAN DOSEN PEMBIMBING	iii
LEMBAR PENGESAHAN DOSEN PENGUJI	iv
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN KARYA ILMIAH SKRIPSI.....	v
MOTTO	vi
PERSEMBAHAN	vii
KATA PENGANTAR	viii
DAFTAR ISI	iv
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR GAMBAR.....	x
DAFTAR LAMPIRAN.....	xi
ABSTRAK	xii
ABSTRACT	xiii
BAB I.....	1
PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Batasan Masalah.....	4
C. Rumusan Masalah	5
D. Tujuan Penelitian	5
E. Manfaat Penelitian	6
BAB II.....	7
KAJIAN PUSTAKA.....	7
A. Kajian Pustaka.....	7
B. Kerangka Konseptual	13

BAB III	14
METODE PENELITIAN	14
A. Tempat Dan Waktu Penelitian	14
B. Jenis Penelitian.....	14
C. Populasi, Sampel dan Teknik Pengambilan Sampel	15
1. Populasi	15
2. Sampel.....	15
3. Teknik Pengambilan Sampel.....	15
D. Variabel Penelitian dan Variabel Operasional.....	16
1. Variabel Independen (Variabel Bebas).....	16
2. Variabel Dependen (Variabel Terikat).....	16
3. Variabel Kontrol (untuk menjaga validitas internal)	17
4. Definisi Operasional Variabel dan Indikator	18
E. Teknik Pengumpulan Data.....	19
F. Instrumen Penelitian	23
1. Alat.....	23
2. Bahan	23
G. Teknik Analisis Data	24
BAB IV	25
HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN.....	25
A. Deskripsi Data.....	25
1. Metabolit Profiling Ekstrak Etanol 96% Herba Tirem (<i>Jaquementia</i> <i>Paniculata</i>) Menggunakan LC-HRMS	26
2. Metabolit Profiling Analisis <i>Principal Component Analysis</i> (PCA)....	53
3. Hasil Study Literatur Dari Senyawa Fitokimia	54

4.	<i>Probability of Activity (Pa)</i>	55
5.	Toksisitas.....	56
6.	Bioavailabilitas	56
7.	Irisan Ven Reseptor- SenyawaProtein-Protein Interaction	57
8.	Protein-Protein Interaction (PPI)	58
9.	KEGG-Pathway	59
10.	Binding Affinitas Hasil <i>Molecular docking</i>	60
11.	Visualisasi 2 Dimensi Ligand senyawa dengan <i>Native ligand</i> Reseptor 61	
B.	Hasil Pengujian Perumusan Masalah	69
1.	Profil Senyawa Bioaktif Ekstrak Etanol 96% Herba Tirem (<i>Jacquemontia paniculata</i>) yang Berpotensi sebagai Agen Laktogenik 69	
2.	Mekanisme Kerja Senyawa Bioaktif Ekstrak Etanol 96% Herba Tirem (<i>Jacquemontia paniculata</i>) terhadap Target Molekuler Aktivitas Laktogenik Berdasarkan Pendekatan <i>Network pharmacology</i>	72
3.	Interaksi Senyawa Bioaktif Ekstrak Etanol 96% Herba Tirem (<i>Jacquemontia paniculata</i>) dengan Protein Target Aktivitas Laktogenik Melalui Simulasi <i>Molecular docking</i>	74
C.	Pembahasan	77
1.	Metabolit Profiling Ekstrak Etanol 96% Herba Tirem (<i>Jaquementia Paniculata</i>) Menggunakan LC-HRMS	77
2.	Metabolit Profiling Analisis PCA.....	79
3.	Study Literatur.....	80
4.	<i>Probability of Activity (Pa)</i>	82
5.	Toksisitas.....	85
6.	Bioavaibilitas.....	87

7. Analisis Irisan Gen Target Senyawa dan Gen Terkait Laktasi	89
8. <i>Protein-Protein Interaction</i> (PPI).....	91
9. KEGG - Pathway	93
10. Binding Affinitas Hasil <i>Molecular docking</i>	97
11. Visualisasi 2 Dimensi Ligand senyawa dengan <i>Native ligand</i> Reseptor	101
BAB V	111
KESIMPULAN DAN SARAN	111
A. Kesimpulan.....	111
B. Saran.....	112
DAFTAR PUSTAKA	113
LAMPIRAN	122

DAFTAR TABEL

Tabel 3. 1 Tabel Definisi Operasional Variabel	18
Tabel 4. 1 Metabolit Profiling Senyawa Herba Tirem LC-HRMS	26
Tabel 4. 2 Metabolit Profiling Hasil PCA Ekstra Tirem.....	53
Tabel 4. 3 Studi Literatur Senyawa Terhadap Target Reseptor.....	55
Tabel 4. 4 <i>Probability of Activity (Pa)</i>	55
Tabel 4. 5 Hasil Uji Toksisitas Senyawa Fitokimia.....	56
Tabel 4. 6 Hasil Drug-likeness Senyawa Fitokimia.....	56
Tabel 4. 7 Binding affinity Hasil Molecular docking Ekstrak Herba Tirem.....	61
Tabel 4. 8 Visualisasi 2 dimensi reseptor EGFR terhadap senyawa kaemferol serta native ligand	62
Tabel 4. 9 Interkasi residu reseptor EGFR terhadap senyawa Kaemferol serta native ligand	62
Tabel 4.10 Visualisasi 2 dimensi reseptor $ER\alpha$ terhadap senyawa kaemferol serta native ligand	63
Tabel 4.11 Interkasi residu reseptor $ER\alpha$ terhadap senyawa Kaemferol serta native ligand	63
Tabel 4.12 Visualisasi 2 dimensi reseptor JAK2 terhadap senyawa kaemferol serta native ligand	65
Tabel 4.13 Interkasi residu reseptor JAK2 terhadap senyawa Kaemferol serta native ligand	65
Tabel 4.14 Visualisasi 2 dimensi reseptor PGR terhadap senyawa kaemferol serta native ligand	66
Tabel 4.15 Interkasi residu reseptor PGR terhadap senyawa Kaemferol serta native ligand	67
Tabel 4.16 Visualisasi 2 dimensi reseptor ERb terhadap senyawa kaemferol serta native ligand	68
Tabel 4.17 Interkasi residu reseptor ERb terhadap senyawa Kaemferol serta native ligand	68
Tabel 4.18 Profilmetabolik kandidat terapi laktogenik ekstrak herba tirem	70
Tabel 4.19 Profil Protein Target Berdasarkan Analisis Network Pharmacology.	73

Tabel 4.20 Rangkuman Perbandingan Affinitas Tingkatan dan Kesamaan Residu Kaemferol Terhadap Reseptor Target.....	75
---	----

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Tanaman Tirem <i>Jacquemontia paniculata</i>	8
Gambar 2.2 Kerangka Konseptual Penelitian	13
Gambar 4.1 Irisan Antara Reseptor-Senyawa dengan Diagram VEN(Image Generate by Venny,Gemini)	57
Gambar 4.2 Protein-Protein Interaction	58
Gambar 4.3 ESTROGEN Signaling pathway	59
Gambar 4.4 Prolactin Signaling pathway	60

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1	Visualisasi Discovery Studio 2D Ligand Dengan Reseptor EGFR	122
Lampiran 2	Visualisasi Discovery Studio 2D Ligand Dengan Reseptor JAK2	126
Lampiran 3	Visualisasi Discovery Studio 2D Ligand Dengan Reseptor PGR	130
Lampiran 4	Visualisasi Discovery Studio 2D Ligand Dengan Reseptor ERB	134
Lampiran 5	Visualisasi Discovery Studio 2D Ligand Dengan Reseptor ERA	138
Lampiran 6	Reseptor RSCB-PDB	142
Lampiran 7	Hasil PCA Loadings Plot.....	144
Lampiran 8	Hasil PCA Scatter Plot	144
Lampiran 9	Struktur Senyawa	145
Lampiran 10	Jadwal Kegiatan Penelitian Skripsi	146
Lampiran 11	Lembar Validasi Pustaka Skripsi	148
Lampiran 12	Biodata Penulis	160