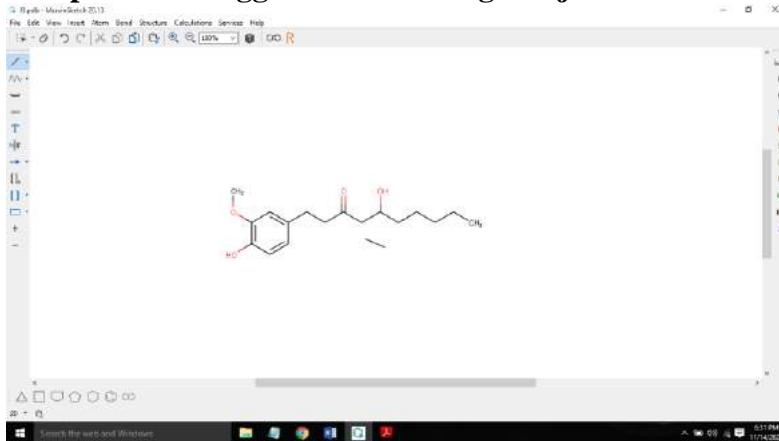
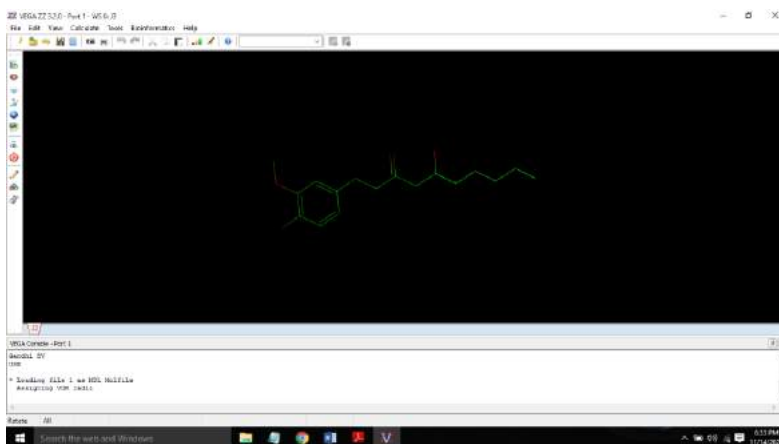


## LAMPIRAN

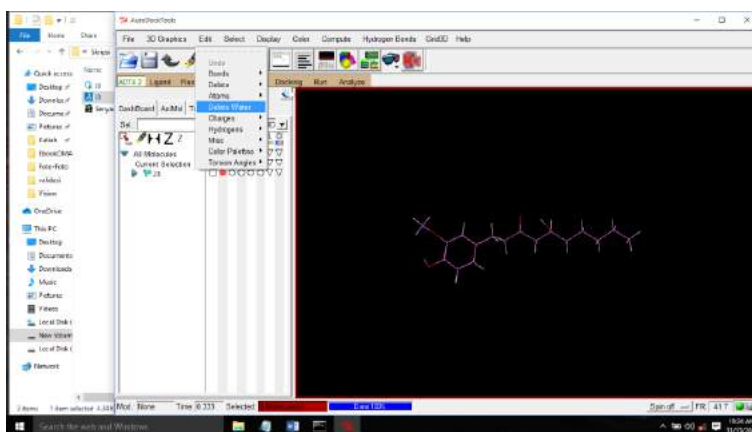
### Lampiran 1. Penggambaran 2D Ligan Uji



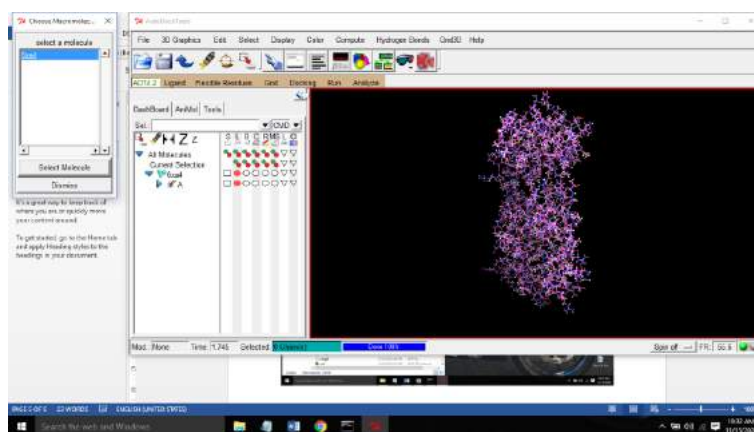
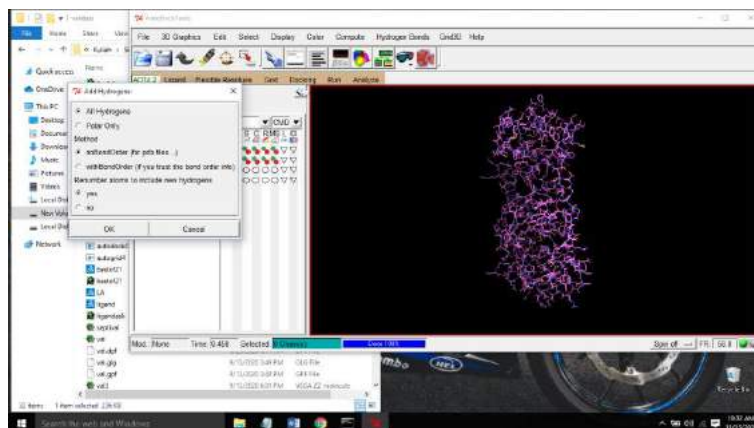
### Lampiran 2. Konversi Struktur .pdb



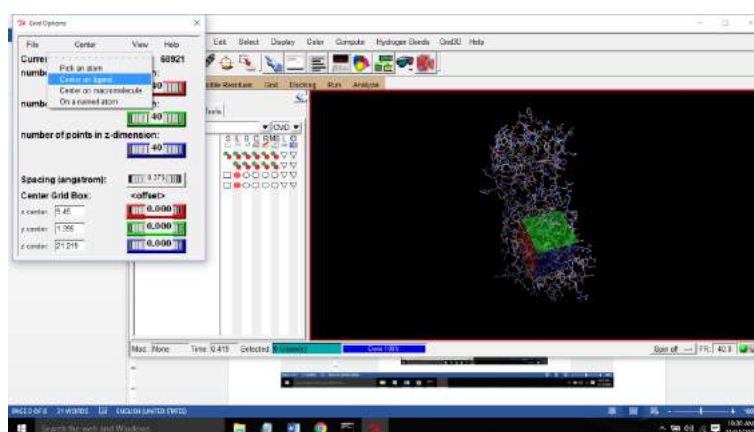
### Lampiran 3. Preparasi Ligan Uji



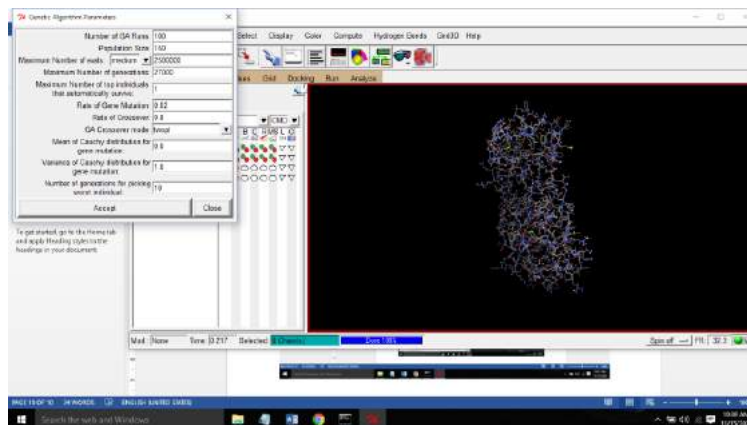
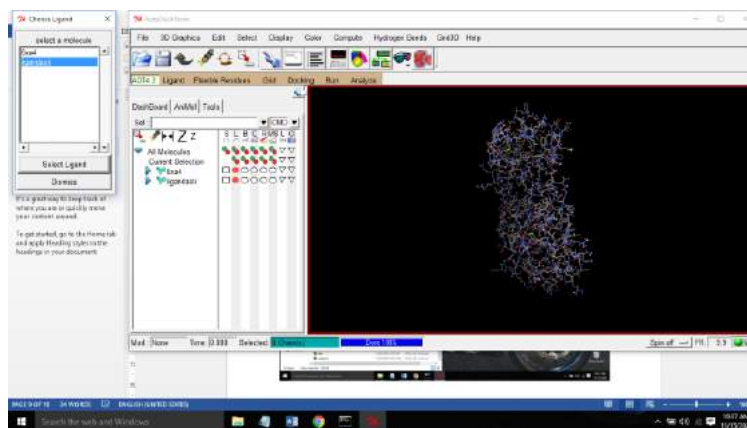
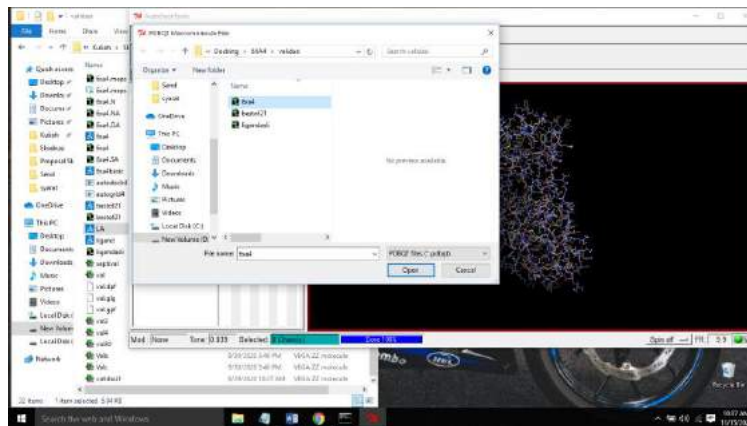
## Lampiran 4. Preparasi protein

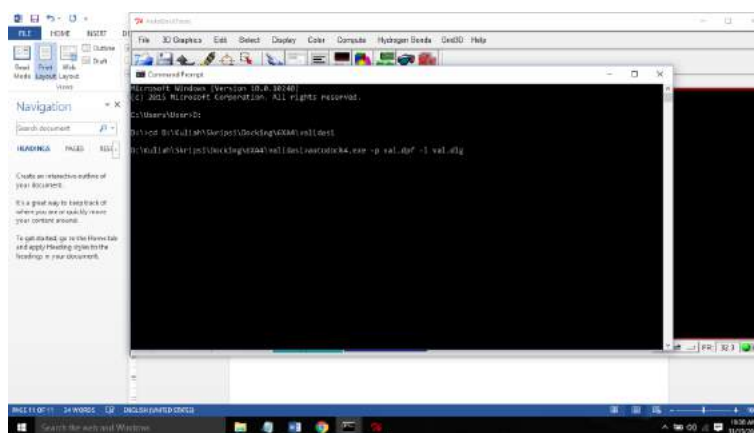
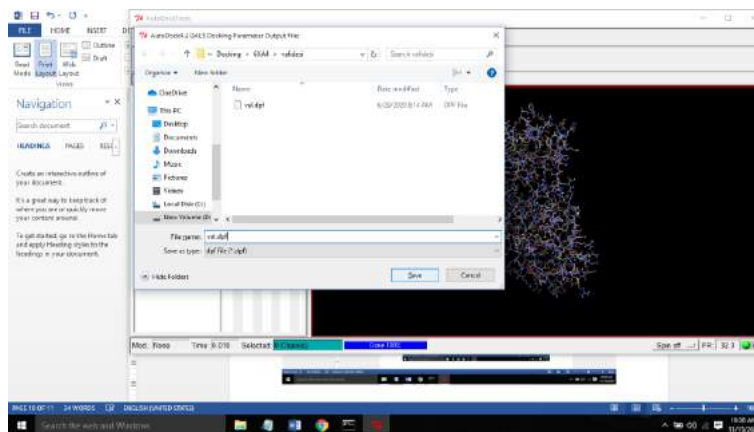


## Lampiran 5. Setting grid

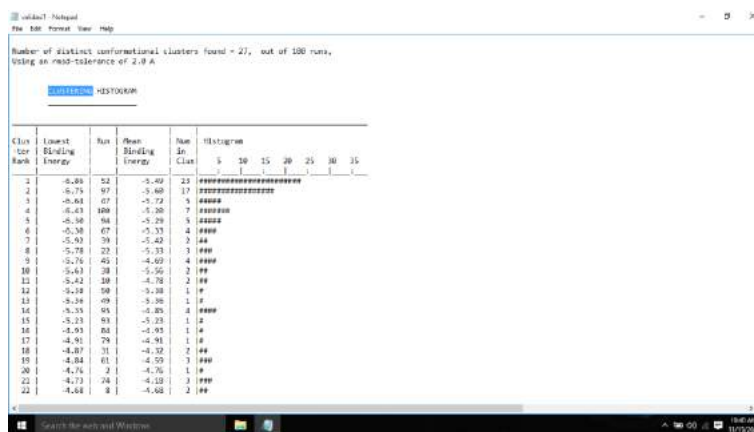


## Lampiran 6. Validasi Penambatan Molekuler

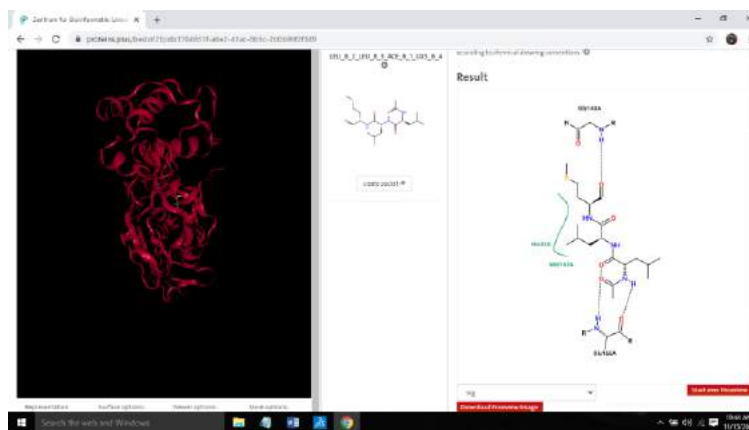
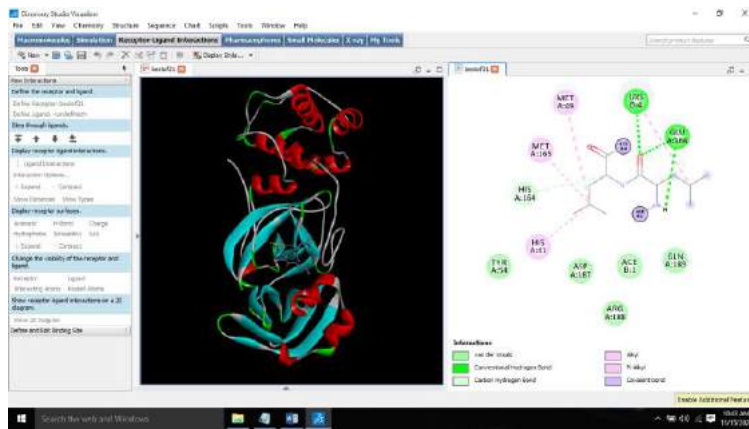




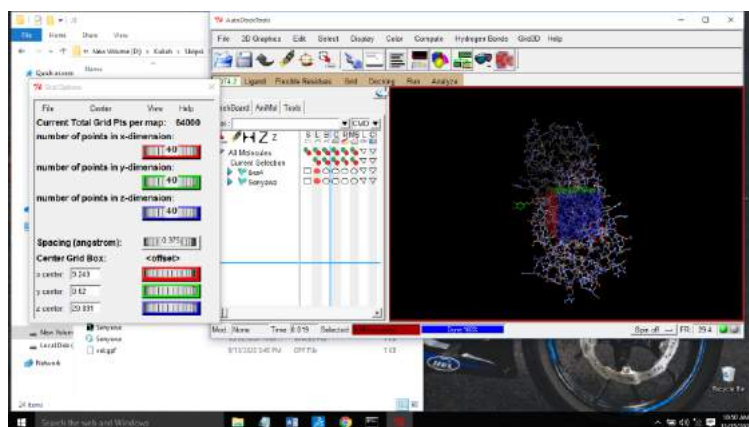
## Lampiran 7. Analisis Penambatan Molekuler

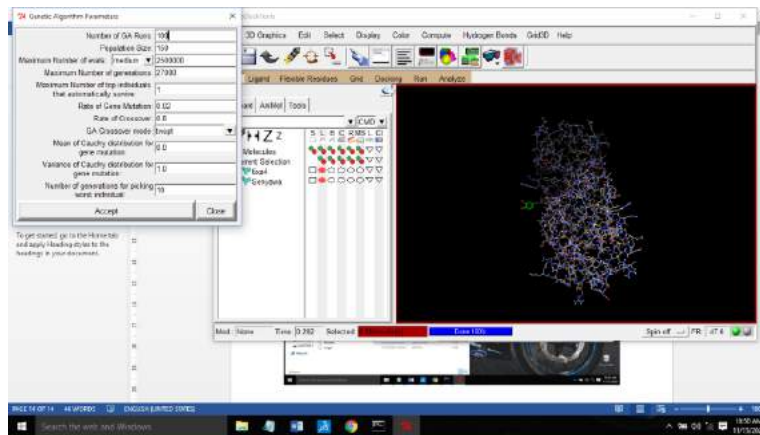


## Lampiran 8. Visualisasi



## Lampiran 9. Penambatan Ligan Uji





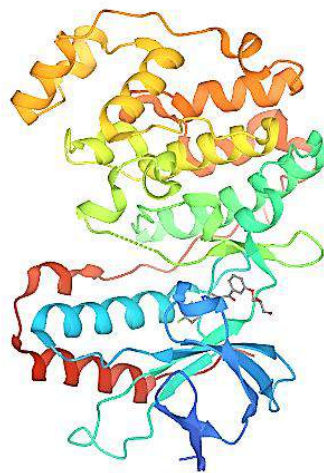
## Lampiran 10. Pembacaan Prediksi Farmakokinetik

The image displays the ADMET Predictor software interface. The main window shows the 'My Inputting SMILES' section with the SMILES string: CC1=CC=C(C=C1)C(=O)O. Below this, there are options for 'By Uploading Files (Local)' and 'By Drawing Molecules From Below'. The 'Model Predictions' section on the right provides a summary of predicted properties:

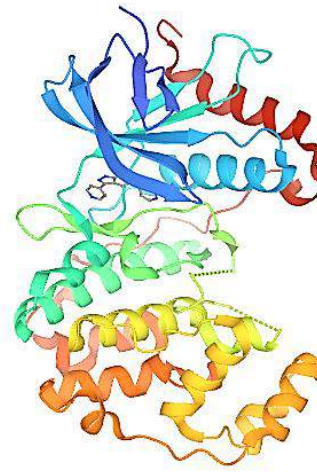
Property	Value
ExplogP	ExplogP
Molwt	Molwt/Atom
Desciption	48
raty	30
q <sup>2</sup>	0.089
q <sup>2</sup>	0.089
R <sup>2</sup>	0.076
RMSE	0.089
RMSECV	0.089
RMSEV	0.089

The interface also includes a sidebar with 'CHECK TO SELECT TO INCLUDE' options and a 'Description' field at the bottom right.

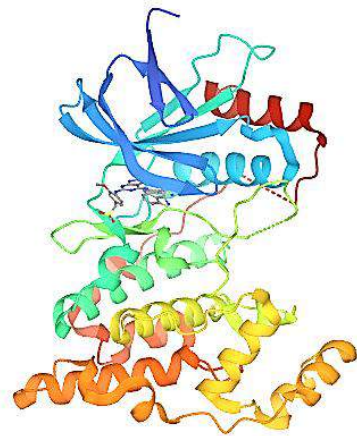
## Lampiran 11. Gambar 3D protein



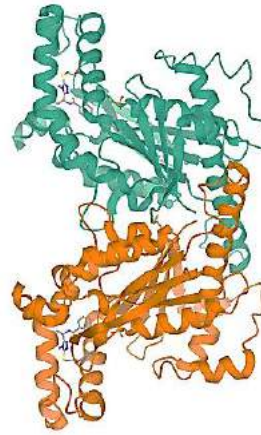
2GFS



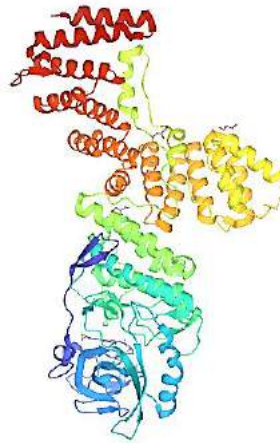
5BUJ



3ELJ



4BFT

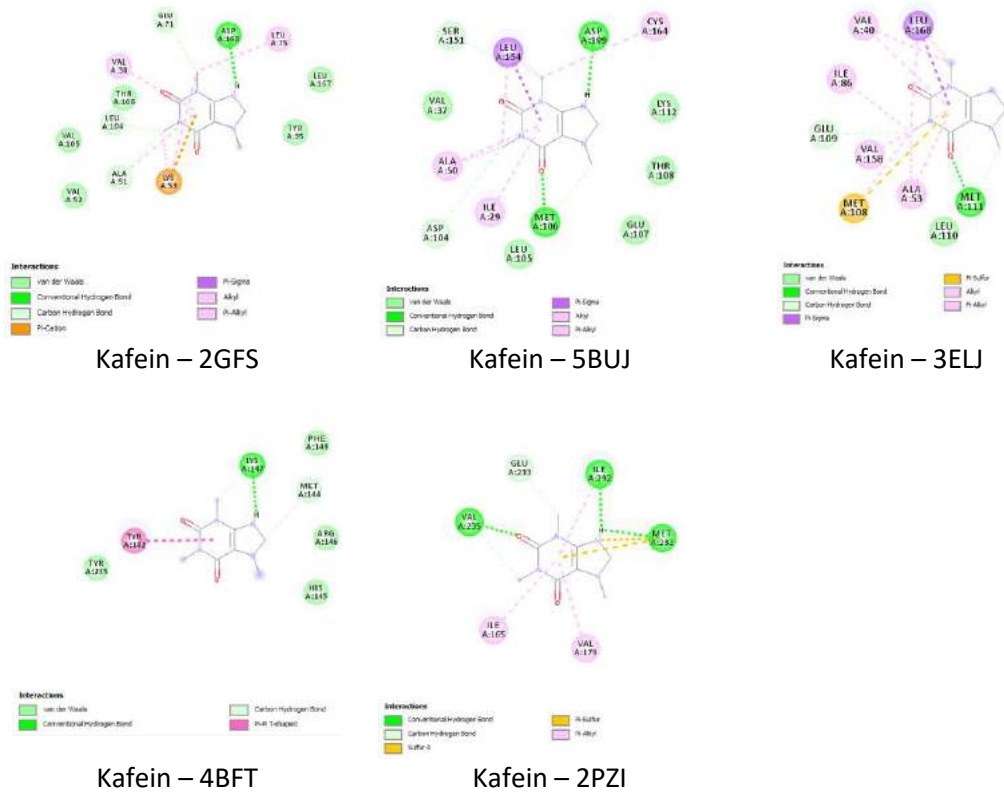


2PZI

**Lampiran 12. Tabel hasil validasi**

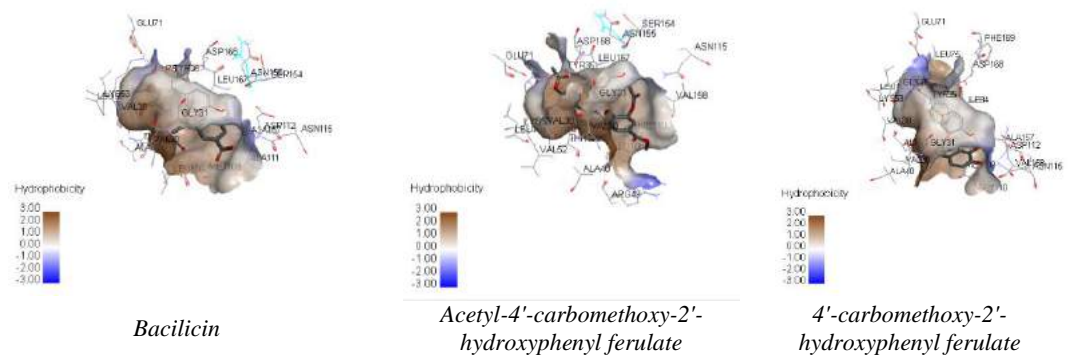
Makromolekul	$\Delta$ binding (kcal/mol)			Rata-rata $\pm$ SD	RMSD			Mean RMSD ( $\text{\AA}$ )
	R1	R2	R3		R1	R2	R3	
2GFS	-8,15	-8,10	-8,0	-8,08 $\pm$ 0,01	0,53	0,51	0,51	0,52
5BUJ	-9,06	-9,06	-9,06	-9,06 $\pm$ 0,00	0,19	0,19	0,19	0,19
3ELJ	-8,82	-8,74	-8,87	-8,81 $\pm$ 0,07	1,61	1,76	1,66	1,68
4BFT	-8,65	-8,72	-8,6	-8,66 $\pm$ 0,06	0,97	0,79	0,94	0,90
2PZI	-8,41	-8,41	-8,41	-8,41 $\pm$ 0,00	0,22	0,14	0,22	0,19

**Lampiran 13. Binding site kontrol negatif**



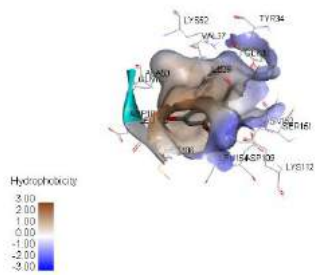
**Lampiran 14. Interaksi ligan dan protein terpilih dalam ruang 3 dimensi**

2GFS

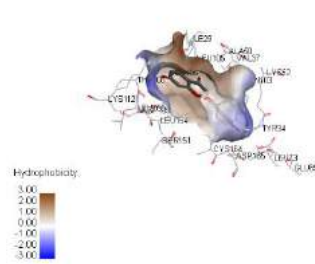




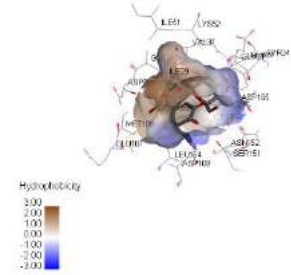
5BUJ



*Acetyl bacilicin*

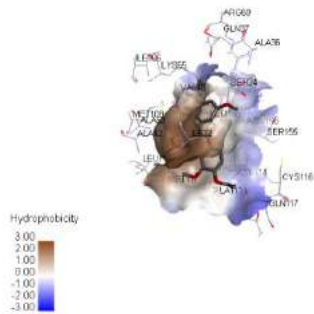


Luteolin

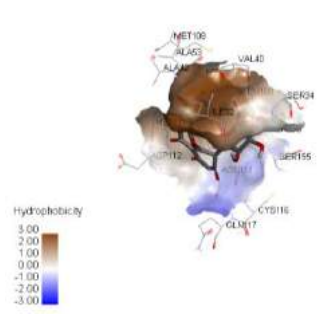


Orientin

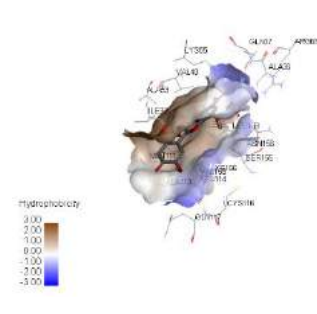
3ELJ



*Bacilicin*

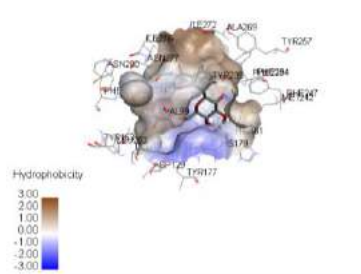


orientin

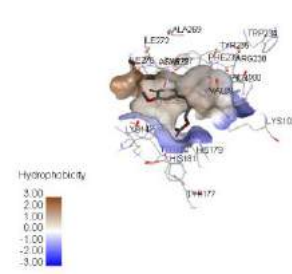


*Acetyl bacilicin*

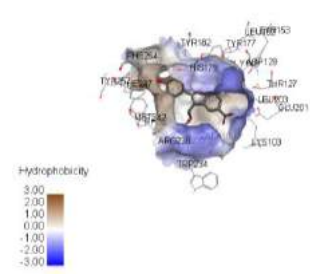
4BFT



Orientin

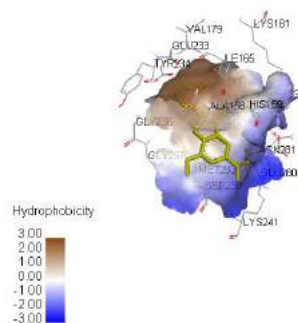


*Acetyl bacilicin*

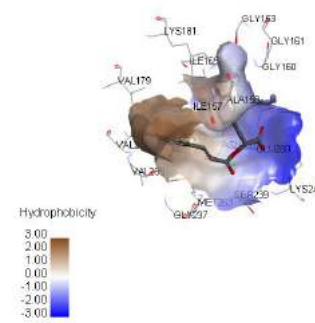


*Bacilicin*

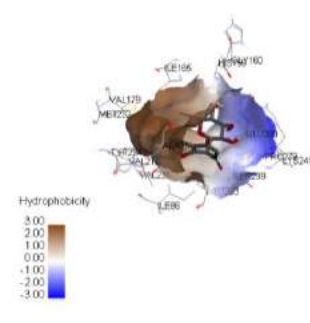
2PZI



*Acetyl bacilicin*



Asam rosmarinat



Orientin

**Lampiran 15. Tabel nilai afinitas pengikatan ( $\Delta G$  Binding) replikasi senyawa selasih**

NO	SENYAWA	P38				ERK2					
		2GFS		Rata-rata	STD	5BUJ		Rata-rata	STD		
1	<i>Bacilin</i>	-8,19	-8,09	-8,15	-8,14	0,05	-10,41	-10,33	-10,35	-10,37	0,04
2	<i>Acetyl bacilicin</i>	-8,65	-8,39	-8,65	-8,56	0,15	-9,29	-9,41	-9,39	-9,36	0,06
3	<i>4'-carbomethoxy-2'-hydroxyphenyl ferulate</i>	-8,12	-8,2	-8,4	-8,24	0,14	-8,42	-7,68	-8,49	-8,20	0,45
4	<i>Methyl Acetyl-4'-carbomethoxy-2'-hydroxyphenyl ferulate</i>	-8,49	-8,29	-8,39	-8,39	0,10	-8,3	-8,45	-7,91	-8,22	0,28
5	<i>methyl (E)-3'-hydroxy-4'-(1''-hydroxyethyl)-phenyl-4-methoxycinnamate</i>	-8,01	-8,03	-7,99	-8,01	0,02	-8,39	-8,0	-8,02	-8,14	0,22
6	Apigenin	-7,79	-7,79	-7,79	-7,79	0,00	-8,59	-8,58	-8,58	-8,58	0,00
7	Luteolin	-7,91	-7,91	-7,9	-7,91	0,01	-9,37	-9,37	-9,37	-9,37	0,00
8	Orientin	-7,39	-7,38	-7,39	-7,39	0,01	-9,84	-9,37	-9,37	-9,37	0,00
9	Asam rosmarinat	-8,23	-8,19	-8,29	-8,24	0,05	-9,25	-9,2	-9,24	-9,23	0,03
10	Eugenol	-5,22	-5,22	-5,22	-5,22	0,00	-5,67	-5,68	-5,66	-5,67	0,01
11	Gemracene D	-6,98	-6,85	-6,86	-6,89	0,07	-6,88	-6,88	-6,88	-6,88	0,00
	RMSD Native	0,53	0,51	0,51	0,52	0,01	0,19	0,19	0,19	0,19	0,00
	Native ligan	-8,15	-8,1	-8,0	-8,08	0,08	-9,06	-9,06	-9,06	-9,06	0,00
	Kontrol negatif Kafein	-4,70	-4,70	-4,70	-4,70	0,00	-4,87	-4,87	-4,87	-4,87	0,00

NO	SENYAWA	JNK					PanK				
		3ELJ			Rata-rata	STD	4BFT		Rata-rata	STD	
1	<i>Bacilin</i>	-8,74	-8,68	-8,69	-8,70	0,03	-8,39	-8,4	-8,37	-8,39	0,02
2	<i>Acetyl bacilicin</i>	-9,44	-9,51	-9,45	-9,47	0,04	-8,42	-8,42	-8,25	-8,36	0,09
3	<i>4'-carbomethoxy-2'-hydroxyphenyl ferulate</i>	-7,2	-7,39	-7,33	-7,31	0,09	-7,17	-7,09	-7,12	-7,13	0,04
4	<i>Methyl Acetyl-4'-carbomethoxy-2'-hydroxyphenyl ferulate</i>	-8,34	-8,34	-8,52	-8,4	0,1	-7,56	-7,4	-7,44	-7,47	0,08
5	<i>methyl (E)-3'-hydroxy-4'-(1''-hydroxyethyl)-phenyl-4-methoxycinnamate</i>	-8,2	-7,32	-8,0	-7,84	0,46	-6,76	-6,83	-6,79	-6,79	0,04
6	Apigenin	-7,19	-7,19	-7,19	-7,19	0,00	-6,54	-6,54	-6,54	-6,54	0,00
7	Luteolin	-7,52	-7,52	-7,52	-7,52	0,00	-6,7	-6,7	-6,7	-6,7	0,00
8	Orientin	-8,98	-8,98	-9,04	-9,00	0,04	-9,15	-9,17	-9,17	-9,16	0,01
9	Asam rosmarinat	-7,66	-8,06	-7,46	-7,73	0,31	-7,16	-7,72	-7,76	-7,55	0,33
10	Eugenol	-4,85	-4,85	-4,85	-4,85	0,00	-5,00	-5,01	-4,31	-4,77	0,40
11	Gemracene D	-6,61	-6,61	-6,61	-6,61	0,00	-6,37	-6,37	-6,37	-6,37	0,00
	RMSD Native	1,61	1,76	1,66	1,68	0,08	0,93	0,80	0,94	0,89	0,07
	Native ligan	-8,82	-8,74	-8,87	-8,81	0,07	-8,65	-8,72	-8,6	-8,66	0,06
	Kontrol negatif Kafein	-4,7	-4,7	-4,7	-4,7	0,00	-4,7	-4,7	-4,7	-4,7	0,00

NO	SENYAWA	PknG				
		2GFS		Rata-rata	STD	
1	<i>2-[4-(acetyloxy)-3-methoxyphenyl]-3-[(acetyloxy)methyl]-7-methoxy-2,3-dihydro-1-benzofuran-5-carboxylic acid</i>	-9,18	-9,18	-9,17	-9,18	0,0
2	<i>3-[(acetyloxy)methyl]-2-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-7-methoxy-2,3-dihydro-1-benzofuran-5-carboxylic acid</i>	-7,53	-7,53	-7,53	-7,53	0,00
3	<i>3-hydroxy-4-(2-hydroxyethyl)phenyl(2E)-3-(4-methoxyphenyl)prop-2-enoate Methyl</i>	-8,33	-8,43	-8,4	-8,39	0,05
4	<i>3-(acetyloxy)-4-{[(2E)-3-[4-(acetyloxy)-3-methoxyphenyl]prop-2-enoyl]oxy}benzoate</i>	-7,78	-7,65	-8,41	-7,95	0,41
5	<i>methyl 3-hydroxy-4-{[(2E)-3-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)prop-2-enoyl]oxy}benzoate</i>	-8,33	-8,4	-8,42	-8,38	0,05
6	Apigenin	-8,01	-8,01	-8,01	-8,01	0,00
7	Luteolin	-8,21	-8,21	-8,21	-8,21	0,00
8	Orientin	-8,45	-8,44	-8,42	-8,44	0,02
9	Asam rosmarinat	-8,76	-8,79	-8,86	-8,8	0,05
10	Eugenol	-5,43	-5,43	-5,43	-5,43	0,00
11	Gemracene D	-7,3	-7,3	-7,3	-7,3	0,00
	RMSD Native	0,223	0,14	0,22	0,19	0,08
	Native ligan	-8,41	-8,41	-8,41	-8,41	0,00
	Kontrol negatif Kafein	-5,48	-5,48	-5,48	-5,48	0,00

### Lampiran 16. Tabel aktivitas run dan num in clus ligan uji terbaik selasih

Senyawa	2GFS		5BUJ		3ELJ		4BFT		2PZI	
	Run	Num in clus	Run	Num in clus	Run	Num in clus	Run	Num in clus	Run	Num in clus
<i>Bacilicin</i>	-	-	11	52	17	93	25	52	38	95
<i>Acetyl bacilicin</i>	49	6	-	-	9	91	28	61	-	-
<i>4'-carbomethoxy-2'-hydroxyphenyl ferulate</i>	87	57	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Luteolin</i>	3	41	24	85	-	-	-	-	-	-
<i>Orientin</i>	-	-	6	100	54	99	61	39	74	47
<i>Asam rosmarinat</i>	-	-	-	-	-	-	-	-	75	52

### Lampiran 17. Hasil Proses Validasi

Parameter		Nilai				
ID PDB	P38 (2GFS)	ERK2 (5BUJ)	JNK (3ELJ)	PanK (4BFT)	PknG (2PZI)	
<b>Ligan asli</b>	<i>5-Amino-1-(4-Fluorophenyl)-1H-Pyrazol-4-Yl] (3-{ [(2r)-2,3-Dihydroxypropyl]Oxy} Phenyl) Methanone</i>	<i>4-[3-(pyridin-4-yl)-2,4,6,7-tetrahydro-5H-pyrazolo[4,3-c]pyridin-5-yl]pyridin-2(1H)-one</i>	<i>2-fluoro-6-[[2-({2-methoxy-4-[(methylsulfonyl)methyl]phenyl)amino)-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidin-4-yl]amino}benzamide</i>	<i>2-chloro-N-[1-(5-[[2-(4-fluorophenoxy)ethyl]sulfanyl]-4-methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)ethyl]benzamide</i>	<i>2-fluoro-6-[[2-({2-methoxy-4[(methylsulfonyl)methyl]phenyl)amino)-7H-pyrrolo[2,3-d]pyrimidin-4-yl]amino}benzamide</i>	
<b>Gridbox</b>	40x40x40	40x40x40	40x40x40	40x40x40	40x40x40	
<b>Grid center</b>	x = 21,958 y = 8,658 z = 33,171	x = -14,837 y = 1,322 z = 14,462	x = 2,672 y = 8,227 z = 30,437	x = -19,342 y = -10,217 z = 12,648	x = 21,666 y = -10,428 z = -4,491	
<b>RMSD (Å)</b>	0,517	0,186	1,675	0,89	0,194	

$\Delta G$ (kkal/mol)	-8,083 $\pm$ 0,08	-9,06 $\pm$ 0,0	-8,81 $\pm$ 0,07	-8,66 $\pm$ 0,06	-8,41 $\pm$ 0,0
<b>Residu AA</b>			32- Ile <sup>b</sup>		
		29-Ile <sup>e</sup>	33- Gly <sup>a</sup>	99- Val	86- Ile <sup>b</sup>
30- Val <sup>a</sup>		34-Tyr <sup>a</sup>	34- Ser <sup>f</sup>	100- Ala	91- Ala <sup>b</sup>
35- Tyr <sup>d</sup>		37-Val <sup>b</sup>	35- Gly <sup>a</sup>	129- Asp	157- Ile <sup>b</sup>
38- Val <sup>a</sup>		50-Ala <sup>b</sup>	40- Val <sup>b</sup>	132-Leu	158- Ala <sup>b</sup>
49- Arg <sup>a</sup>		52-Lys <sup>c</sup>	53- Ala <sup>b</sup>	147- Lys	165- Ile <sup>b</sup>
51- Ala <sup>b</sup>		69- Glu <sup>a</sup>	55- Lys <sup>a</sup>	148- Gly	179- Val <sup>b</sup>
53- Lys <sup>h</sup>		82- Ile <sup>a</sup>	86- Ile <sup>a</sup>	153- Tyr	181- Lys <sup>a</sup>
84- Ile <sup>c</sup>		103- Gln <sup>a</sup>	108- Met <sup>g</sup>	179- His	211- Val <sup>a</sup>
106- Tyr <sup>c</sup>		104- Asp <sup>c</sup>	109- Glu <sup>a</sup>	182- Tyr	232- Met <sup>a</sup>
107- His <sup>c</sup>		105- Leu <sup>a</sup>	110- Leu <sup>a</sup>	203- Leu	233- Glu <sup>c</sup>
108- Leu <sup>a</sup>		106- Met <sup>c</sup>	111- Met <sup>c</sup>	235- Tyr	234- Tyr <sup>b</sup>
109- Met <sup>c</sup>		108- Thr <sup>a</sup>	112- Asp <sup>d</sup>	238- Arg	235- Val <sup>c</sup>
110- Gly <sup>a</sup>		109- Asp <sup>c</sup>	113- Ala <sup>a</sup>	239- Phe	236- Gly <sup>a</sup>
111- Ala <sup>a</sup>		112- Lys <sup>c</sup>	114- Asn <sup>c</sup>	242- Met	237- Gly <sup>a</sup>
112- Asp <sup>a</sup>		154- Leu <sup>e</sup>	117- Gln <sup>a</sup>	254- Phe	283- Met <sup>a</sup>
157- Ala <sup>b</sup>		164- Cys <sup>c</sup>	156-Asn <sup>a</sup>	272- Ile	292- Ile <sup>e</sup>
167- Leu <sup>b</sup>		165- Asp <sup>c</sup>	158- Val <sup>e</sup>	276- Ile	293- Asp <sup>a</sup>
			168- Leu <sup>b</sup>	277- Asn	

<sup>a</sup> Interaksi Van der Waals; <sup>b</sup> Interaksi Alkil/Pi-alkil; <sup>c</sup> Ikatan Hidrogen; <sup>d</sup> Pi-Pi-*shaped*/Pi-Pi *stacked*/Amida-Pi *stacked*; <sup>e</sup> Interaksi Pi-sigma; <sup>f</sup> Halogen; <sup>g</sup> Pi-sulfur; <sup>h</sup> *Unfavorable Bump*/Donor-donor

**Lampiran 18. Hasil Penambatan Molekul Ligan Uji Terhadap Protein P38**

Ligan	Ligan Asli	ABA	ACA	CA	BA
$\Delta G$ (kkal/mol)	-8,083 $\pm$ 0,08	-8,563 $\pm$ 0,15	-8,39 $\pm$ 0,1	-8,24 $\pm$ 0,02	-8,143 $\pm$ 0,05
<b>Residu Asam Amino yang berinteraksi</b>		30-Val <sup>a</sup> 35-Tyr <sup>d</sup> 38-Val <sup>b</sup> Leu75 <sup>a</sup> 51-Ala <sup>b</sup> 53-Lys <sup>c</sup> 84-Ile <sup>a</sup> 106-Thr <sup>c</sup> -	30-Val <sup>b</sup> 35-Tyr <sup>d</sup> - 49-Arg <sup>a</sup> 51-Ala <sup>a</sup> 53-Lys <sup>c</sup> 84-Ile <sup>a</sup> 106-Thr <sup>a</sup> 107-His <sup>a</sup> -	30-Val <sup>a</sup> 35-Tyr <sup>d</sup> - - 51-Ala <sup>a</sup> 53-Lys <sup>a</sup> - 107-His <sup>a</sup> 108-Leu <sup>a</sup> 109-Met <sup>c</sup> -	30-Val <sup>b</sup> 35-Tyr <sup>d</sup> - - 53-Lys <sup>c</sup> 84-Ile <sup>a</sup> 106-Thr <sup>a</sup> 107-His <sup>a</sup> - 109-Met <sup>c</sup> 110-Gly <sup>a</sup> 111-Ala <sup>a</sup> -
	30- Val <sup>a</sup> 35- Tyr <sup>d</sup> 38- Val <sup>a</sup> 49- Arg <sup>a</sup> 51- Ala <sup>b</sup> 53- Lys <sup>h</sup> 84- Ile <sup>c</sup> 106- Tyr <sup>c</sup> 107- His <sup>c</sup> 108- Leu <sup>a</sup> 109- Met <sup>c</sup> 110- Gly <sup>a</sup> 111- Ala <sup>a</sup> 112- Asp <sup>a</sup> 157- Ala <sup>b</sup> 157- Ala <sup>b</sup> 167- Leu <sup>b</sup>	108-Leu <sup>a</sup> 109-Met <sup>c</sup> -	110-Gly <sup>a</sup> 111-Ala <sup>a</sup> 112-Asp <sup>a</sup> 157-Ala <sup>a</sup> 167-Leu <sup>b</sup> 71-Glu <sup>a</sup> 75-Leu <sup>a</sup> 115-Asn <sup>a</sup> 108-Leu <sup>b</sup>	109-Met <sup>c</sup> 108-Leu <sup>a</sup> 109-Met <sup>c</sup> -	110-Gly <sup>a</sup> 111-Ala <sup>a</sup> -
<b>Kesamaan asam amino dengan ligan asli (%)</b>		75	100	56,25	56,25

<b>Kesamaan jenis interaksi dengan ligan asli (%)</b>	43,75	43,75	31,25	25
<b>Kesamaan interaksi ligan-reseptor* (%)</b>	32,81	43,75	17,58	14,06

<sup>a</sup> Interaksi Van der Waals; <sup>b</sup> Interaksi Alkil/Pi-alkil; <sup>c</sup> Ikatan Hidrogen; <sup>d</sup> Pi-Pi-*shaped*/Pi-Pi *stacked*/Amida-Pi *stacked*; <sup>e</sup> Interaksi Pi-sigma; <sup>f</sup> Halogen; <sup>g</sup> Pi-sulfur; <sup>h</sup> *Unfavorable Bump*/Donor-donor; BA : *Bacilicin*; ABA : *Acetyl-bacilicin*; CA : *4'-carbomethoxy-2'-hydroxyphenyl ferulate*; ACA : *Acetyl-4'-carbomethoxy-2'-hydroxyphenyl ferulate*; ORI : Orientin; LU : Luteolin; ROS : Asam rosmarinat

#### Lampiran 19. Hasil Penambatan Ligan Uji dengan protein ERK2

<b>Ligan</b>	<b>Ligan Asli</b>	<b>BA</b>	<b>LU</b>	<b>ORI</b>	<b>ABA</b>
<b>ΔG (kkal/mol)</b>	-9,06 ± 0,08	-10,363 ± 0,04	-9,37 ± 0,0	-9,87 ± 0,03	-9,363 ± 0,06
<b>Residu Asam Amino yang berinteraksi</b>	29-Ile <sup>e</sup>	29-Ile <sup>e</sup>	29-Ile <sup>b</sup>	29-Ile <sup>a</sup>	29-Ile <sup>a</sup>
	34-Tyr <sup>a</sup>	34-Tyr <sup>e</sup>	34-Tyr <sup>a</sup>	34-Tyr <sup>d</sup>	-
	37-Val <sup>b</sup>	37-Val <sup>a</sup>	37-Val <sup>a</sup>	37-Val <sup>b</sup>	37-Val <sup>b</sup>
	50-Ala <sup>b</sup>	50-Ala <sup>b</sup>	50-Val <sup>a</sup>	50-Ala <sup>b</sup>	50-Ala <sup>c</sup>
	52-Lys <sup>c</sup>	52-Lys <sup>c</sup>	52-Lys <sup>c</sup>	52-Lys <sup>c</sup>	52-Lys <sup>a</sup>
	69- Glu <sup>a</sup>	69-Glu <sup>a</sup>	-	69-Glu <sup>a</sup>	69-Glu <sup>a</sup>
	82- Ile <sup>a</sup>	82-Ile <sup>a</sup>	82-Ile <sup>a</sup>	82-Ile <sup>a</sup>	82-Ile <sup>a</sup>
	103- Gln <sup>a</sup>	103-Gln <sup>c</sup>	103-Gln <sup>c</sup>	103-Gln <sup>c</sup>	103-Gln <sup>c</sup>
	104- Asp <sup>c</sup>	104-Asp <sup>c</sup>	104-Asp <sup>a</sup>	-	104-Asp <sup>a</sup>
	105- Leu <sup>a</sup>	105-Leu <sup>a</sup>	105-Leu <sup>a</sup>	105-Leu <sup>c</sup>	105-Leu <sup>a</sup>
	106- Met <sup>c</sup>	106-Met <sup>a</sup>	106-Met <sup>c</sup>	106-Met <sup>c</sup>	106-Met <sup>c</sup>
	108- Thr <sup>a</sup>	108-Thr <sup>a</sup>	108-Thr <sup>a</sup>	108-Thr <sup>a</sup>	108-Thr <sup>b</sup>
	109- Asp <sup>c</sup>	109-Asp <sup>a</sup>	109-Asp <sup>a</sup>	109-Asp <sup>a</sup>	109-Asp <sup>a</sup>
	112- Lys <sup>c</sup>	112-Lys <sup>h</sup>	112-Lys <sup>a</sup>	112-Lys <sup>c</sup>	112-Lys <sup>h</sup>
			154-Leu <sup>a</sup>		



154- Leu <sup>c</sup>	154-Leu <sup>c</sup>	164-Cys <sup>a</sup>	154-Leu <sup>c</sup>	154-Leu <sup>h</sup>
164- Cys <sup>c</sup>	164-Cys <sup>b</sup>	165-Asp <sup>c</sup>	164-Cys <sup>c</sup>	164-Cys <sup>b</sup>
165- Asp <sup>c</sup>	165-Asp <sup>c</sup>	30-Gly <sup>a</sup>	165-Asp <sup>c</sup>	165-Asp <sup>c</sup>
	30-Gly <sup>a</sup>	51-Ile <sup>a</sup>		30-Gly <sup>a</sup>
	73-Leu <sup>a</sup>			
<b>Kesamaan asam amino dengan ligan asli (%)</b>	100	94,12	94,12	94,12
<b>Kesamaan jenis interaksi dengan ligan asli (%)</b>	58,82	41,18	64,71	35,29
<b>Kesamaan interaksi ligan-reseptor* (%)</b>	58,82	38,75	60,90	33,22

<sup>a</sup> Interaksi Van der Waals; <sup>b</sup> Interaksi Alkil/Pi-alkil; <sup>c</sup> Ikatan Hidrogen; <sup>d</sup> Pi-Pi-*shaped*/Pi-Pi *stacked*/Amida-Pi *stacked*; <sup>e</sup> Interaksi Pi-sigma; <sup>f</sup> Halogen; <sup>g</sup> Pi-sulfur; <sup>h</sup> *Unfavorable Bump*/Donor-donor; BA : *Bacilicin*; ABA : *Acetyl-bacilicin*; CA : *4'-carbomethoxy-2'-hydroxyphenyl ferulate*; ACA : *Acetyl-4'-carbomethoxy-2'-hydroxyphenyl ferulate*; ORI : Orientin; LU : Luteolin; ROS : Asam rosmarinat

#### Lampiran 20. Hasil Penambatan Ligan Uji dengan protein JNK

Ligan	Ligan Asli	BA	ABA	ORI	ROS
$\Delta G$ (kkal/mol)	$-8,81 \pm 0,07$	$-8,703 \pm 0,03$	$-9,467 \pm 0,04$	$-9,0 \pm 0,$	$-8,4 \pm 0,03$
Residu Asam Amino yang berinteraksi	32- Ile <sup>b</sup>	32-Ile <sup>b</sup>	32-Ile <sup>b</sup>	-	-
	33- Gly <sup>a</sup>	-	-	33-Gly <sup>a</sup>	-
	34- Ser <sup>f</sup>	34-Ser <sup>a</sup>	34-Ser <sup>a</sup>	34-Ser <sup>c</sup>	35-Gly <sup>a</sup>
	35- Gly <sup>a</sup>	35-Gly <sup>a</sup>	35-Gly <sup>a</sup>	35-Gly <sup>a</sup>	40-Val <sup>a</sup>
	40- Val <sup>b</sup>	40-Val <sup>c</sup>	-	40-Val <sup>a</sup>	53-Ala <sup>b</sup>
	53- Ala <sup>b</sup>	53-Ala <sup>a</sup>	53-Ala <sup>a</sup>	53-Ala <sup>b</sup>	-
	55- Lys <sup>a</sup>	55-Lys <sup>g</sup>	55-Lys <sup>g</sup>	-	86-Ile <sup>a</sup>
	86- Ile <sup>a</sup>	86-Ile <sup>a</sup>	86-Ile <sup>a</sup>	86-Ile <sup>a</sup>	108-Met <sup>a</sup>

108- Met <sup>g</sup>	108-Met <sup>a</sup>	108-Met <sup>a</sup>	108-Met <sup>a</sup>	-
109- Glu <sup>a</sup>	109-Glu <sup>a</sup>	109-Glu <sup>a</sup>	-	110-Leu <sup>a</sup>
110- Leu <sup>a</sup>	110-Leu <sup>a</sup>	110-Leu <sup>b</sup>	110-Leu <sup>a</sup>	111-Met <sup>c</sup>
111- Met <sup>c</sup>	111-Met <sup>c</sup>	111-Met <sup>c</sup>	111-Met <sup>c</sup>	-
112- Asp <sup>d</sup>	112-Asp <sup>a</sup>	112-Asp <sup>a</sup>	112-Asp <sup>a</sup>	-
113- Ala <sup>a</sup>	113-Ala <sup>c</sup>	112-Ala <sup>c</sup>	113-Ala <sup>a</sup>	114-Asn <sup>c</sup>
114- Asn <sup>c</sup>	114-Asn <sup>c</sup>	114-Asn <sup>c</sup>	114-Asn <sup>c</sup>	117-Gln <sup>a</sup>
117- Gln <sup>a</sup>	117-Gln <sup>a</sup>	117-Gln <sup>a</sup>	117-Gln <sup>a</sup>	-
156-Asn <sup>a</sup>	-	-	-	-
158- Val <sup>e</sup>	158-Val <sup>a</sup>	158-Val <sup>a</sup>	158-Val <sup>e</sup>	168-Leu <sup>b</sup>
168- Leu <sup>b</sup>	168-Leu <sup>b</sup>	168-Leu <sup>e</sup>	168-Leu <sup>b</sup>	
Kesamaan asam amino dengan ligan asli (%)	89,47	84,21	84,21	52,63
Kesamaan jenis interaksi dengan ligan asli (%)	47,37	36,84	57,89	31,58
Kesamaan interaksi ligan-reseptor* (%)	42,38	31,02	48,75	16,62

<sup>a</sup> Interaksi Van der Waals; <sup>b</sup> Interaksi Alkil/Pi-alkil; <sup>c</sup> Ikatan Hidrogen; <sup>d</sup> Pi-Pi-*shaped*/Pi-Pi *stacked*/Amida-Pi *stacked*; <sup>e</sup> Interaksi Pi-sigma; <sup>f</sup> Halogen; <sup>g</sup> Pi-sulfur; <sup>h</sup> *Unfavorable Bump*/Donor-donor; BA : *Bacilicin*; ABA : *Acetyl-bacilicin*; CA : *4'-carbomethoxy-2'-hydroxyphenyl ferulate*; ACA : *Acetyl-4'-carbomethoxy-2'-hydroxyphenyl ferulate*; ORI : *Orientin*; LU : *Luteolin*; ROS : *Asam rosmarinat*

## Lampiran 21. Hasil Penambatan Ligan Uji dengan protein PanK

Ligan	Ligan Asli	BA	ABA	ORI	CA
$\Delta G$ (kkal/mol)	$-8,66 \pm 0,06$	$-8,387 \pm 0,02$	$-8,363 \pm 0,09$	$-9,163 \pm 0,01$	$-7,467 \pm 0,08$
<b>Residu Asam Amino yang berinteraksi</b>	99- Val	-	99-Val	99-Val	-
	100- Ala	-	100-Ala	-	-
	129- Asp	-	129-Asp	-	-
	132-Leu	-	132-Leu	132-leu	-
	147- Lys	-	-	147-Lys	-
	148- Gly	-	-	148-Gly	-
	153- Tyr	-	-	153-Tyr	-
	179- His	179-His <sup>h</sup>	179-His	179-His	179-His <sup>h</sup>
	182- Tyr	182-Tyr <sup>a</sup>	182-Tyr	182-Tyr	-
	203- Leu	-	203-Leu	203-Leu	-
	235- Tyr	235-Tyr <sup>e</sup>	235-Tyr	235-Tyr	-
	238- Arg	238-Arg <sup>h</sup>	238-Arg	-	238-Arg <sup>h</sup>
	239- Phe	239-Phe <sup>b</sup>	239-Phe	239-Phe	-
	242- Met	242-Met <sup>b</sup>	242-Met	242-Met	242-Met <sup>b</sup>
	254- Phe	254-Phe <sup>a</sup>	254-Phe	254-Phe	254-Phe <sup>a</sup>
	272- Ile	272-Ile <sup>a</sup>	272-Ile	272-Ile	272-Ile <sup>a</sup>
	276- Ile	-	-	276-Ile	280-Asn <sup>a</sup>
	277- Asn	-	-	277-Asn	-
<b>Kesamaan asam amino dengan ligan asli (%)</b>		44,44	72,22	83,33	27,78
<b>Kesamaan jenis interaksi dengan ligan asli (%)</b>		5,56	16,67	22,22	5,56

<b>Kesamaan interaksi ligan-reseptor* (%)</b>	2,47	12,04	18,52	1,54
---	------	-------	-------	------

<sup>a</sup> Interaksi Van der Waals; <sup>b</sup> Interaksi Alkil/Pi-alkil; <sup>c</sup> Ikatan Hidrogen; <sup>d</sup> Pi-Pi-*shaped*/Pi-Pi *stacked*/Amida-Pi *stacked*; <sup>e</sup> Interaksi Pi-sigma; <sup>f</sup> Halogen; <sup>g</sup> Pi-sulfur; <sup>h</sup> *Unfavorable Bump*/Donor-donor; BA : *Bacilicin*; ABA : *Acetyl-bacilicin*; CA : *4'-carbomethoxy-2'-hydroxyphenyl ferulate*; ACA : *Acetyl-4'-carbomethoxy-2'-hydroxyphenyl ferulate*; ORI : *Orientin*; LU : *Luteolin*; ROS : *Asam rosmarinat*

### Lampiran 22. Hasil Penambatan Ligan Uji dengan protein PknG

<b>Ligan</b>	<b>Ligan Asli</b>	<b>BA</b>	<b>ORI</b>	<b>ROS</b>	<b>CA</b>
<b>ΔG (kkal/mol)</b>	-8,41 ± 0,0	-9,18 ± 0,0	-8,44 ± 0,02	-8,8 ± 0,06	-8,39 ± 0,..
<b>Residu Asam Amino yang berinteraksi</b>	86- Ile <sup>b</sup>	-	-	-	-
	91- Ala <sup>b</sup>	-	91-Ala <sup>a</sup>	-	-
	157- Ile <sup>b</sup>	157-Ile <sup>a</sup>	157-Ile <sup>a</sup>	157-Ile <sup>b</sup>	-
	158- Ala <sup>b</sup>	158-Ala <sup>b</sup>	158-Ala <sup>a</sup>	158-Ala <sup>b</sup>	158-Ala <sup>b</sup>
	165- Ile <sup>b</sup>	165-Ile <sup>a</sup>	165-Ile <sup>a</sup>	165-Ile <sup>b</sup>	165-Ile <sup>a</sup>
	179- Val <sup>b</sup>	179-Val <sup>a</sup>	179-Val <sup>b</sup>	179-Val <sup>b</sup>	179-Val <sup>a</sup>
	181- Lys <sup>a</sup>	181-Lys <sup>c</sup>	-	181-Lys <sup>c</sup>	181-Lys <sup>c</sup>
	211- Val <sup>a</sup>	211-Val <sup>a</sup>	211-Val <sup>a</sup>	211-Val <sup>a</sup>	211-Val <sup>a</sup>
	232- Met <sup>a</sup>	232-Met <sup>a</sup>	232-Met <sup>a</sup>	-	-
	233- Glu <sup>c</sup>	-	-	233-Tyr <sup>a</sup>	233-Tyr <sup>a</sup>
	234- Tyr <sup>b</sup>	234-Tyr <sup>c</sup>	234-Tyr <sup>c</sup>	234-Tyr <sup>a</sup>	234-Tyr <sup>a</sup>
	235- Val <sup>c</sup>	235-Val <sup>a</sup>	235-Val <sup>b</sup>	235-Val <sup>c</sup>	235-Val <sup>c</sup>
	236- Gly <sup>a</sup>	-	236-Gly <sup>a</sup>	-	-
	237- Gly <sup>a</sup>	237-Gly <sup>a</sup>	237-Gly <sup>a</sup>	-	-
	283- Met <sup>a</sup>	283-Met <sup>b</sup>	283-Met <sup>b</sup>	283-Met <sup>b</sup>	283-Met <sup>b</sup>
				292-Ile <sup>b</sup>	292-Ile <sup>b</sup>

	292- Ile <sup>c</sup>	292-Ile <sup>c</sup>	292-Ile <sup>b</sup>	-	-
	293- Asp <sup>a</sup>	293-Asp <sup>a</sup>	-		
<b>Kesamaan asam amino dengan ligan asli (%)</b>		76,47	88,24	64,71	58,82
<b>Kesamaan jenis interaksi dengan ligan asli (%)</b>		29,41	29,41	35,29	29,41
<b>Kesamaan interaksi ligan-reseptor* (%)</b>		22,49	25,95	22,84	17,30

<sup>a</sup> Interaksi Van der Waals; <sup>b</sup> Interaksi Alkil/Pi-alkil; <sup>c</sup> Ikatan Hidrogen; <sup>d</sup> Pi-Pi-shaped/Pi-Pi stacked/Amida-Pi stacked; <sup>e</sup> Interaksi Pi-sigma; <sup>f</sup> Halogen; <sup>g</sup> Pi-sulfur; <sup>h</sup> Unfavorable Bump/Donor-donor; BA : Bacilicin; ABA : Acetyl-bacilicin; CA : 4'-carbomethoxy-2'-hydroxyphenyl ferulate; ACA : Acetyl-4'-carbomethoxy-2'-hydroxyphenyl ferulate; ORI : Orientin; LU : Luteolin; ROS : Asam rosmarinat