

**ANALISIS PENAMBATAN MOLEKULER KANDUNGAN KIMIA
JINTAN HITAM (*Nigella sativa* L.) TERHADAP TARGET TERAPI
INFLAMASI**



Oleh :

Vellyas Hadi Saputri

23175211A

**FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS SETIA BUDI
SURAKARTA
2021**

**ANALISIS PENAMBATAN MOLEKULER KANDUNGAN KIMIA
JINTAN HITAM (*Nigella sativa* L.) TERHADAP TARGET TERAPI
INFLAMASI**

SKRIPSI

*diajukan untuk memenuhi salah satu syarat mencapai
Derajat Sarjana Farmasi (S.Farm).
Program Studi Ilmu Farmasi pada Fakultas Farmasi
Universitas Setia Budi.)*

Oleh

Vellyas Hadi Saputri

23175211A

**FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS SETIA BUDI
SURAKARTA
2021**

HALAMAN PERSEMBAHAN

This script belongs to :

Allah SWT atas rahmat dan ridho-Nya.

Nabi Muhammad SAW suri tauladan sepanjang zaman.

Bapak Miftahchul Hadi dan Ibu Rohima atas segala dukungan dan do'a yang selalu menyertai dan selalu menjadi tempat disaat kehilangan arah dan motivasi untuk tetap semangat.

Adikku Aljohani satria Hadi tercinta dan nenek seluruh keluarga yang selalu memberikan motivasi dan dorongannya

Dosen pembimbing Dr. Rina Herowati, M.Si dan Apt ,Ismi Puspitasari, M.Farm. sebagai pembimbing dan motivator agar tetap semangat dan tak pantang menyerah. Semoga lelah mereka menjadi amal ibadah dan ilmu yang bermanfaat untuk kedepannya.

Sahabatku tercinta Alfiani Nurul Azizah, Dwi Sinta .K, Ayuk Wulandari, Nia ayu puspitasari, Kadek Violanita Putri surapati, dan Septiana Aulia yang telah memberikan semangat dan motivasi.dimanapun kalian berada yang selalu berbagi tawa dan duka,

dan tentunya untuk diriku sendiri karena telah berhasil melewati semua masalah dan masih bertahan sampai hari ini.

PENGESAHAN SKRIPSI

Berjudul :

**ANALISIS PENAMBATAN MOLEKULER KANDUNGAN KIMIA
JINTAN HITAM (*Nigella sativa* L.) TERHADAP TARGET TERAPI
INFLAMASI oleh :**

Vellyas Hadi Saputri 23175211A

Dipertahankan dihadapan Panitia Penguji Skripsi

Fakultas Farmasi Universitas Setia Budi

Pada tanggal : 27 juli 2021

Mengetahui,
Fakultas Farmasi
Universitas Setia Budi
Dekan,

Prof. Dr. apt. R.A. Oetari, SU., MM., M.Sc.

Pembimbing

Dr. apt. Rina Herowati, M.Si.

Pembimbing Pendamping

Apt. Ismi Puspitasari, M.Farm

Penguji :

1. Dr. Nuraini Harmastuti, M.Si
2. Prof. Dr. Muchalal, DEA
3. Hery Muhamad Ansory, M.Sc
4. Dr. apt. Rina Herowati, M.Si

HALAMAN PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi ini adalah hasil pekerjaan saya sendiri dan tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu Perguruan Tinggi dan sepanjang pengetahuan saya tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Apabila skrip ini terdapat jiplakan dari penelitian/karya ilmiah/skripsi orang lain, maka saya siap menerima sanksi, baik secara akademis maupun hukum.

Surakarta, 02 Juli 2021

Tanda tangan



Vellyas Hadi Saputri

KATA PENGANTAR

Assalamu'alaikum Warrahmatullahi Wabarakatuh

Segala puji dan syukur di panjatkan atas kehadiran Tuhan Yang Maha Esa atas segala rahmat dan hidayah-Nya, sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini. Skripsi ini berjudul “ANALISIS PENAMBATAN MOLEKULER KANDUNGAN KIMIA JINTAN HITAM (*Nigella sativa* L.) TERHADAP TARGET TERAPI INFLAMASI ”. Penyusunan skripsi ini guna memenuhi persyaratan untuk memperoleh gelar kesarjanaan pada Fakultas Farmasi Universitas Setia Budi Surakarta.

Dalam penyusunan skripsi ini penulis tidak terlepas dari bantuan, bimbingan, dan dukungan dari berbagai pihak, maka dengan kesempatan kali ini penulis dengan sepenuh hati mengucapkan terima kasih kepada:

1. Dr. Ir. Djoni Tarigan, MBA, selaku Rektor Universitas Setia Budi Surakarta
2. Prof. Dr. apt R.A. Oetari, SU., MM., M.Sc. Selaku Dekan Fakultas Farmasi Universitas Setia Budi Surakarta.
3. Dr. apt. Wiwin Herdwiani, S.Farm, M.Sc. Selaku Kepala Program Studi S1 Farmasi Universitas Setia Budi Surakarta.
4. Dr. Apt. Rina Herowati, M.Si. selaku pembimbing utama yang telah bersedia membimbing, memberikan banyak dukungan, semangat, fasilitas, dan bertukar pikiran sehingga membantu terselesaikannya skripsi ini.
5. Apt ,Ismi Puspitasari, M.Farm selaku pembimbing pendamping yang telah membimbing, memberikan masukan, dan fasilitas sehingga membantu terselesaikannya skripsi ini.
6. Dr. Nuraini Harmastuti, M.Si., Prof. Dr. Muchalal, DEA., Hery Muhamad Ansory, M.Sc., selaku tim penguji.
7. Seluruh dosen, karyawan dan staf Universitas Setia Budi Surakarta.
8. Kepada kedua orang tua Bapak Miftachul Hadi, Ibu Rohima, dan adik Aljohani Satria Hadi yang sangat banyak memberikan bantuan material, bimbingan, dan selalu mendoakan untuk keberhasilan dan kesuksesan penulis.

9. Kepada teori 3 S1 Farmasi Angkatan 2017 dan kelompok praktikum F atas segala dukungan, bantuan, dan semangatnya.
10. Kepada teman-teman Ceribel (Citra, Nurul, Shinta, Ayuk, Nia, Septi, Vero, dan Lani).
11. Kepada idolaku yang selalu dapat menghibur baik suka maupun duka D.O. Renjun, Jungwoo, Xiumin, Lukas dan semua Member EXO dan NCT
12. Kepada semua orang yang telah membantu dalam membuat skripsi ini.

Penulis menyadari bahwa masih banyak kekurangan dalam menyusun skripsi ini dan jauh dari kata sempurna, untuk itu kritik dan saran yang bersifat membangun dari para pembaca sangat diharapkan penulis. Penulis berharap skripsi ini dapat bermanfaat bagi pengembangan dan kemajuan khususnya dalam bidang farmasi.

Surakarta, 02 Juli 2021

Vellyas Hadi saputri

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN SAMPUL	i
HALAMAN JUDUL	ii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iii
PENGESAHAN SKRIPSI	iv
KATA PENGANTAR	vi
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR LAMPIRAN	ix
ABSTRAK	x
ABSTRACT	xi
BAB I PENDAHULUAN	2
A. Latar Belakang Masalah	2
B. Rumusan Masalah	5
C. Tujuan	5
D. Manfaat	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	6
A. Inflamasi	6
1. Sitokinin	6
2. Enzim siklooksigenase (COX)	7
B. Protein Target Inflamasi	8
1. COX-2	8
2. Fosfolipase A2	9
3. p38 MAPK	10
C. Jintan Hitam	10
1. Klasifikasi	10
2. Morfologi	11
3. Kandungan kimia	11
D. Komputasi di Bidang Penemuan Obat	14
1. Penambatan molekuler	14
2. Parameter farmakokinetika	15
E. Perangkat Lunak dan Web Server	15

1. PubChem.....	15
2. Protein data bank (PDB).....	16
3. MarvinSketch.....	16
4. Vega ZZ.....	16
5. Pymol.....	17
6. Autodock.....	17
F. Hipotesis.....	18
BAB III METODE PENELITIAN.....	19
A. Populasi dan Sampel.....	19
B. Variabel Penelitian.....	19
1. Identifikasi variabel utama.....	19
2. Klasifikasi variabel utama.....	19
3. Definisi operasional variabel utama.....	20
C. Alat dan Bahan.....	20
1. Alat.....	20
2. Bahan.....	21
D. Cara Kerja.....	21
1. Pencarian Target Molekuler.....	21
2. Cara kerja penambatan molekuler.....	21
E. Analisis Hasil Penambatan Molekuler.....	23
1. Energi ikatan.....	23
2. Data interaksi.....	23
3. Prediksi ADME.....	24
F. Skema Jalannya Penelitian.....	25
Bab IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN.....	26
A. Pencarian Makromolekul.....	26
B. Preparasi Ligan Uji.....	26
C. Pengunduhan dan Preparasi Molekuler.....	27
D. Validasi Metode Penambatan Molekuler.....	27
E. Proses Penambatan Molekuler.....	29
F. Interaksi Ligan Uji dan Reseptor.....	31
1. Interaksi ligan dengan Fosfolipase A2.....	31
2. Interaksi ligan dengan p38 MAPK.....	33
3. Interaksi ligan dengan COX-2.....	35

G. Parameter Profil Farmakokinetika.....	38
1. Parameter Fisikokimia.....	38
2. Absorpsi.....	40
3. Distribusi.....	41
4. Metabolisme.....	42
5. Ekskresi.....	44
BAB 5 KESIMPULAN DAN SARAN.....	45
A. Kesimpulan.....	45
B. Saran.....	45
DAFTAR PUSTAKA	47

DAFTAR TABEL

	Halaman
Tabel 1. Kandungan kimia Jintan hitam	12
Tabel 3 Informasi makromolekul dan ligan asli	26
Tabel 4 Hasil Validasi Penambatan Molekuler.....	28
Tabel 5 Hasil Penambatan Molekuler.....	30
Tabel 5 Hasil Prediksi Sifat Fisikokimia	39
Tabel 6 Hasil prediksi Absorpsi	40
Tabel .7 Hasil prediksi distribusi	41
Tabel 8 Hasil prediksi metabolisme inhibitor	42
Tabel .9 Hasil profil metabolisme substrat	43
Tabel 10 Hasil profil ekskresi	44

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1. Skema mediator inflamasi)	8
Gambar 2. Foto jintan hitam	11
Gambar 3 Hasil Overlay	28
Gambar 4 interaksi fosfolipase A2 dengan hmps-PLA2.....	31
Gambar 6 Hasil penambatan senyawa Thymoquinone dengan protein fosfolipase A2... 32	
Gambar 7 Hasil penambatan senyawa nigellimine dengan protein fosfolipase A2.....	33
Gambar 8 interaksi p38 MAPK dengan.....	33
Gambar 9 Hasil penambatan senyawa Thymoquinone dengan protein p38 MAPK.....	34
Gambar 10 Hasil penambatan senyawa Nigellimine dengan protein p38 MAPK.....	34
Gambar 11 Diagram interaksi protein COX-2 dengan Rofecoxib.....	35
Gambar 12 Hasil penambatan senyawa Thymoquinone dengan protein COX-2	36
Gambar 13 Hasil penambatan senyawa) nigellimine dengan protein COX-2	36
Gambar 10 grafik persamaan antara ikatan energi bebas dan persentase kemiripan.....	38

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Struktur 3D Makromolekul	52
Lampiran 2. Pengoptimal senyawa menggunakan VegaZZ	53
Lampiran 3. Interaksi ligan uji dengan makromolekul	55
Lampiran 4. Prediksi ADME menggunakan ADME lab	57

ABSTRAK

SAPUTRI, V. H., 2020, ANALISIS PENAMBATAN MOLEKULER KANDUNGAN KIMIA JINTAN HITAM (*NIGELLA SATIVA L.*) TERHADAP TARGET TERAPI INFLAMASI, SKRIPSI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA

Jintan hitam (*Nigella sativa L.*) telah diketahui secara empiris memiliki khasiat sebagai anti inflamasi. Enzim yang mempengaruhi pada inflamasi adalah fosfolipase A₂ dan siklooksigenase (COX). Tujuan dari Penelitian ini ingin mengetahui interaksi antara senyawa yang terdapat jintan hitam berdasarkan skor konformasinya dan mengetahui prediksi profil farmakokinetika dari senyawa jintan hitam.

Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah penambatan molekuler dengan menggunakan perangkat lunak MarvinSkech, VegaZZ, 1.5.6, Autodock 4, PyMOL dan Discovery Studio. Hasil penambatan dinilai dari energi ikatan yang terbentuk antara senyawa uji dengan target terapi. Senyawa yang berhasil berikatan dengan protein target dilakukan uji profil farmakokinetik menggunakan ADMETLab untuk mengetahui profil ADME dari senyawa yang berpotensi sebagai anti inflamasi.

Jintan hitam yang memiliki potensi sebagai obat anti inflamasi pada target protein COX-2, Fosfolipase A₂, dan p38 MAPK, adalah thymoquinone dan nigellimine. Profil farmakokinetika pada senyawa thymoquinone memenuhi syarat dan aturan Lipinski, tidak dapat berdifusi pada sawar otak, bukan substrat protein gp, dan banyak di metabolisme pada CYP450 sedangkan pada senyawa nigellimine hasil yang didapatkan kurang baik dan tidak memenuhi aturan lipinski, berdifusi pada sawar otak dan berperan sebagai inhibitor CYP3A4.

Kata kunci : Inflamasi, jintan hitam, *Nigella sativa*, docking molekuler, COX-2 , fosfolipase A₂, dan p38 MAPK.

ABSTRACT

SAPUTRI, V. H., 2020, ANALYSIS OF THE CHEMICAL CONTENT OF BLACK CUMIN (NIGELLA SATIVA L.) TESTING ANALYSIS ON TARGETS OF INFLAMMATION THERAPY. PROPOSAL, UNIVERSITY OF SETIA BUDI

Black cumin (*Nigella sativa* L.) has been known to have anti-inflammatory properties. Enzymes that play a role of inflammatory way are phospholipids A2 and cyclooxygenase (COX). The purposes of this study was to determine the interaction between compounds that contain black cumin based on its conformation score and find the pharmacokinetic profile prediction of black cumin compounds.

The method used in this study was docking molecular by software of MarvinSketch, VegaZZ, Autodock 4, PyMOL and Discovery Studio. The lower the bond energy value between the test compound and the target, the more stable the complex formed. Compounds that successfully bind to the target protein were tested for pharmacokinetic profiles using ADMETLab to determine the ADME profile of compounds which have the potential to be used as an anti-inflammatory.

Black cumin displays potential for used as an anti-inflammatory drug for targeting protein cox-2, phospholipase a2, and p38 MAPK due to the presence of thymoquinone and nigellimine the pharmacokinetic profiles of thymoquinone for the lipinski rule, could not diffuse on the brain barrier, not the gp protein substrate, and most metabolized by cyp450, whereas nigellimine did not met the lipinski rule requirements, could not diffuse in the brain barrier, were not gp protein substrate, and generally include cyp3a4 inhibitors.

Keywords: Inflammation, black cumin, *Nigella sativa*, molecular docking, COX-2, phospholipase A2, and p38 MAPK.

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang Masalah

Inflamasi adalah suatu respons tubuh terhadap rangsangan yang merugikan dikarenakan timbulnya berbagai macam agen berbahaya di antaranya, infeksi dan cedera fisik. Inflamasi terjadi bila ada gejala kalor (hangat), *dolor* (nyeri), *rubor* (kemerahan), dan tumor (bengkak) (Maniar *et al.*,2020). Respons inflamasi adalah jalur koordinasi aktivitas terhadap sinyal yang mengatur tingkat mediator inflamasi pada sel, jaringan residen, dan sel inflamasi yang terdapat di darah. Inflamasi memiliki beberapa respons di antaranya aktivasi reseptor pengenalan pola, aktivasi jalur inflamasi, dan penanda inflamasi (*Inflammatory markers*). Aktivasi jalur inflamasi berdampak pada patogenesis dan sejumlah penyakit kronis, dan melibatkan umum mediator inflamasi dan jalur regulasi. Stimulus inflamasi mengaktifkan jalur sinyal intraseluler, yang kemudian mengaktifkan produksi mediator inflamasi (Chen *et al.*. 2020). Mediator kimiawi dari proses inflamasi dihasilkan dari bermacam-macam zat seperti plasma dan sel-sel dari jaringan yang rusak, selain itu terdapat enzim seperti *fosfolipase A2*, protein yang diaktifkan mitogen p38 kinase (p38 MAPK), siklooksigenase-2 (Cox-2), leukotrien B4 *dehidrogenase* (LTB4DHR) yang muncul sesuai penyebab terjadinya inflamasi (Elgazar *et al.*,2019).

Obat yang biasa digunakan adalah golongan NSAID (*Non Steroidal Anti-inflammatory Drugs*) bekerja dengan cara menghambat enzim siklooksigenase (COX) COX-1 dan COX-2. Hasil penggunaan obat NSAID yang didapatkan tidak hanya menimbulkan efek terapi yang diinginkan tetapi juga dapat menimbulkan efek samping yang tidak diinginkan Efek samping NSAID yang paling sering terjadi adalah tukak lambung atau tukak *peptic*, hematemesis, dan melena yang diakibatkan oleh peradangan saluran cerna (Maniar *et al.*,2020; Soleha *et al.*,2020) NSAID yang digunakan tidak hanya menimbulkan efek terapi yang diinginkan tetapi juga dapat menimbulkan efek samping yang tidak diinginkan.

Efek samping NSAID yang paling sering terjadi adalah tukak lambung atau tukak *peptic*, hematemesis, dan melena yang diakibatkan oleh peradangan saluran cerna (Maniar *et al.*,2020; Soleha *et al.*,2020). Menurut Solomonet *al.*,(2017), penambahan jumlah risiko yang dihasilkan oleh penggunaan obat NSAID yang diuji cobakan secara *precision* pada pasien yang dipilih secara acak pada negara- negara yang ada di benua Amerika dan Eropa. Berdasarkan efek samping tersebut menyebabkan banyaknya masyarakat beralih ke obat tradisional atau obat yang berasal dari bahan alami, yang banyak disebut sebagai gaya hidup kembali ke alam atau *back to nature*, hal ini dipercaya bahwa obat alam lebih aman dibandingkan dengan obat-obat kimia. Salah satu tanaman yang memiliki potensi sebagai obat herbal efek anti inflamasi adalah jintan hitam.

Jintan hitam (*Nigella sativa* L.) yang dikenal dengan sebutan “*black cumin*” atau *Habbatussauda*, merupakan tumbuhan obat, namun bukan asli Indonesia karena tumbuhan tersebut tumbuh di daerah Mediterania dan juga dibudidayakan di Turki. Khasiat jintan hitam adalah anti inflamasi, asma, bronkitis, antihistamin atau efek alergi, antikanker, dan antibakteri (Marlinda 2015). Aktivitas farmakologi jintan hitam yang telah dibuktikan pada penelitian sebelumnya dapat membuktikan potensi farmakologi anti inflamasi. *Thymoquinone* yang terkandung pada jintan hitam diujikan secara *in vitro* dengan dosis 18 mg/kg BB tikus secara signifikan meningkatkan imobilisasi dalam plasma sehingga menurunkan NO dari tikus yang stres (Gilhota *et al.*.2011). Studi *in vivo* efek anti inflamasi dari jintan hitam dikonfirmasi pada dosis 25, 50, dan 100 mg/kg yang diujikan pada mencit selama 5 hari. Aktivitas dari metabolit sekunder *thymoquinone* dan *dihidrat thymoquinone* menunjukkan aktivitas dengan mengikat anion superoksida pada jaringan telah diinduksi inflamasi dan pada penelitian terbaru secara *in vivo* kandungan *thymoquinone* pada jintan hitam dapat menekan COX-2 (Amin dan Hosseinzadeh , 2016). Biji jintan hitam mengandung minyak dalam jumlah besar, dan komponen utama ekstrak biji jintan hitam adalah *thymoquinone*. Kandungan dalam jintan hitam memiliki beberapa efek farmakologis termasuk *thymoquinone*, *Thymoquinone*, *dithymoquinone*, *thymol*, *carvacrol*, *nigelicin*, *nigellimine x-oxide*, *nigelidine* dan *alpha-hederin* (Marlinda, 2015). Sehingga diperlukan lebih banyak

lagi penelitian untuk memastikan bahwa jintan hitam memiliki kandungan kimia yang memiliki efek farmakologi anti inflamasi salah satunya adalah dengan metode penambatan molekuler.

Penambatan molekuler digunakan sebagai identifikasi awal terhadap molekuler target yang dimana sebagai agen anti inflamasi dari senyawa alami. Metode ini sangat menarik, melibatkan berbagai disiplin ilmu yang diterapkan di dalamnya. Berbagai penelitian dasar dapat digabungkan dan saling menstimulasi sehingga saling melengkapi (Gomeni *et al.*2001).

Protein target yang digunakan dalam penelitian ini mengacu pada penelitian Elgazar *et al.*,(2019) yaitu target molekuler khas pada inflamasi seperti fosfolipase A2, p38 *alpha mitogen activated protein kinase*, dan *Cyclooxygenase-2*, dapat berinteraksi baik dengan bioaktif pada tanaman jintan hitam menggunakan metode penambatan molekuler pada FlexX *docking engine* di dalam perangkat lunak LeadIT, lalu senyawa pasca penambatan molekuler dilakukan parameter ADME menggunakan TCMSP, sedangkan pada penelitian ini penambatan molekuler menggunakan perangkat lunak autodock 1.5.6 karena perangkat lunak ini dapat menganalisis detail dari hasil penambatan dan *webtools* untuk memprediksi profil farmakokinetik adalah ADMETlab karena hasil skrining yang dihasilkan cepat dan dapat menyaring berdasarkan model prediksi yang spesifik (Dong *et al.*,2020).

Penelitian ini bertujuan untuk mengidentifikasi target anti inflamasi dari senyawa kimia pada jintan hitam yang diketahui memiliki efek farmakologi anti inflamasi, kemudian dipilih protein target yang terlibat pada inflamasi yang selanjutnya dianalisis lebih lanjut untuk menentukan *energy binding* secara *in silico* menggunakan aplikasi Autodock 1.5.6 dan diprediksi parameter farmakokinetika berupa prediksi ADME kandungan kimia pada jintan hitam menggunakan situs web ADMETlab (<http://admet.scbdd.com/>).

ADMETlab merupakan suatu web yang dapat diakses secara gratis di <http://admet.scbdd.com/> yang digunakan untuk memprediksi proses absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, dan toksisitas atau efek samping yang merugikan. ADMETlab tersedia 288.967 *database* yang dapat diakses dan juga terdapat *Brain Blood Barrier* yang dapat digunakan untuk melakukan analisis obat,

memprediksi ADMET (31 penilaian titik akhir), evaluasi sistematis, dan pencarian kesamaan yang memberikan pemahaman menyeluruh tentang sejumlah senyawa dan dapat dilakukan skrining dengan cepat (Daina *et al.*,2017).

B. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang permasalahan yang telah dipaparkan, maka diambil suatu rumusan masalah yaitu:

1. Apa saja kandungan kimia dari jintan hitam yang diprediksi memiliki afinitas yang baik sebagai anti inflamasi terhadap target inflamasi yaitu COX-2, Fosfolipase A2, dan p38 MAPK?
2. Bagaimana model interaksi senyawa dalam jintan hitam terhadap protein target anti inflamasi?
3. Bagaimana prediksi parameter farmakokinetika berupa prediksi ADME kandungan kimia jintan hitam yang terpilih?

C. Tujuan

Berdasarkan rumusan masalah yang telah dipaparkan, maka tujuan penelitian yaitu:

1. Mengetahui kandungan kimia dari jintan hitam yang diprediksi memiliki afinitas yang baik sebagai anti inflamasi terhadap target inflamasi yaitu COX-2, Fosfolipase A2, dan p38 MAPK.
2. Mengetahui interaksi dari protein target inflamasi terhadap kandungan senyawa jintan hitam.
3. Mengetahui bagaimana prediksi parameter farmakokinetika berupa prediksi ADME kandungan kimia jintan hitam yang terpilih.

D. Manfaat

Manfaat yang diharapkan dari penelitian adalah mendapatkan target molekuler inflamasi dari kandungan kimia pada jintan hitam yang berpotensi sebagai anti inflamasi kemudian, untuk meningkatkan aktivitas berdasarkan interaksi obat-target. Bagi peneliti, penelitian ini dapat menambah wawasan dan keterampilan terkait hasil yang didapatkan dalam analisis penambatan molekuler.