

## ANALISIS *DOCKING* MOLEKULER TERHADAP LIGAN POTENSIAL PADA PROTEIN 7Q5F

### Molecular Docking Analysis of Potential Ligands against 7Q5F Protein

Frisca Salda Putri & Ali Amran

Universitas Negeri Padang

friscasp31@gmail.com

#### Article Info:

Submitted:	Revised:	Accepted:	Published:
Mar 28, 2026	Apr 25, 2026	May 7, 2026	May 12, 2026

#### Abstract

The main protein of SARS-CoV-2 with PDB ID 7Q5F is one of the important targets in the development of antiviral drug candidates. This study aims to evaluate the potential of natural compounds from gambir (*Uncaria gambir*) in inhibiting the activity of the 7Q5F protein through the molecular docking method. The protein and ligand structures were prepared using MOE 2022 software, followed by docking simulations to analyze the strength and stability of the interactions based on binding energy (S-score) and RMSD values. The results showed that linalool had better interaction ability, with an S-score of -4.48 and an RMSD of 0.79 Å, compared with limonene, which had an S-score of -4.04 and an RMSD of 3.13 Å. These findings indicate that linalool is more stable and more precise in binding to the active site of the 7Q5F protein. Thus, natural compounds from gambir, particularly linalool, have the potential to be developed as antiviral drug candidates against SARS-CoV-2. This study provides an initial contribution to the exploration of plant-based compounds as antiviral therapeutic candidates, although further validation through laboratory research is still required.

**Keywords:** Molecular Docking; SARS-CoV-2; 7Q5F Protein; *Uncaria gambir*; Linalool

**Abstrak:** Protein utama SARS-CoV-2 dengan PDB ID 7Q5F merupakan salah satu target penting dalam pengembangan kandidat obat antivirus. Penelitian ini bertujuan untuk mengevaluasi potensi senyawa alami dari gambir (*Uncaria gambir*) dalam menghambat kerja protein 7Q5F melalui metode penambatan molekuler. Struktur protein dan ligan disiapkan menggunakan perangkat lunak MOE 2022, kemudian dilakukan simulasi penambatan untuk menganalisis kekuatan dan stabilitas interaksi berdasarkan nilai energi ikatan (*S-score*) dan RMSD. Hasil penelitian menunjukkan bahwa linalool memiliki kemampuan interaksi yang lebih baik dengan nilai *S-score* -4,48 dan RMSD 0,79 Å dibandingkan limonene yang memiliki *S-score* -4,04 dan RMSD 3,13 Å. Temuan ini mengindikasikan bahwa linalool lebih stabil dan lebih tepat dalam berikatan dengan sisi aktif protein 7Q5F. Dengan demikian, senyawa alami dari gambir, terutama linalool, berpotensi dikembangkan sebagai kandidat obat antivirus terhadap SARS-CoV-2. Penelitian ini memberikan kontribusi awal bagi eksplorasi senyawa nabati sebagai kandidat terapeutik antivirus, meskipun validasi lebih lanjut melalui penelitian laboratorium masih diperlukan.

**Kata Kunci:** Penambatan Molekuler; SARS-CoV-2; Protein 7Q5F; *Uncaria Gambir*; Linalool

## PENDAHULUAN

Indonesia memiliki kekayaan keanekaragaman hayati yang sangat besar, dengan sekitar 40.000 spesies tumbuhan, di antaranya sekitar 1.300 spesies dapat dimanfaatkan sebagai bahan pengobatan tradisional. Hal ini didukung oleh masyarakat Indonesia yang terdiri dari berbagai suku dan budaya, serta memiliki beragam pengetahuan lokal mengenai pemanfaatan tumbuhan yang dipercaya memiliki khasiat penyembuhan dan mampu mengatasi berbagai jenis penyakit. Pengetahuan tersebut diwariskan secara turun-temurun dan terus berkembang sesuai dengan kondisi sosial dan lingkungan. Tanaman obat merupakan salah satu jenis tanaman yang sangat populer karena dapat digunakan sebagai bahan baku obat tradisional maupun herbal, serta diyakini mampu meningkatkan daya tahan tubuh ketika dikonsumsi (Ermawati et al., 2022; Siregar, Tanjung, et al., 2020).

Tanaman obat dari Indonesia memiliki kontribusi yang signifikan dalam perkembangan industri farmasi di tingkat global (Nugraha et al., 2022). Beberapa obat modern diketahui berasal dari tumbuhan tropis, termasuk yang berasal dari Indonesia, seperti tanaman tapak dara yang menghasilkan vinblastin sebagai obat antikanker, serta senyawa reserpin yang digunakan untuk mengatasi hipertensi. Pemanfaatan tanaman obat dapat dilakukan melalui berbagai cara, baik secara oral, topikal, maupun inhalasi, melalui interaksi senyawa aktif dengan reseptor sel yang memicu respons biologis (Siregar, Hadiguna, et al., 2020).

Coronavirus merupakan kelompok virus yang dapat menginfeksi manusia maupun hewan dan umumnya menyerang sistem pernapasan. Pada manusia, infeksi ini dapat menyebabkan gejala ringan seperti flu hingga penyakit serius seperti *Middle East Respiratory Syndrome* (MERS) dan *Severe Acute Respiratory Syndrome* (SARS) (Pakpahan & Fitriani, 2020). SARS-CoV-2 adalah salah satu jenis coronavirus yang menjadi penyebab COVID-19, yaitu penyakit yang menyerang sistem pernapasan dan berpotensi berkembang menjadi kondisi yang serius (Huang et al., 2020). Sejak kemunculannya, COVID-19 telah menyebar secara luas dan menjadi pandemi global di berbagai negara, termasuk Indonesia, dengan jumlah kasus dan angka kematian yang tinggi, sehingga menimbulkan dampak besar terhadap kesehatan masyarakat di seluruh dunia (Dewi & Riyandari, 2020).

Penanganan COVID-19 masih terus dikembangkan dengan pendekatan yang menitikberatkan pada pengelolaan gejala serta peningkatan sistem kekebalan tubuh pasien. Upaya pencegahan juga dilakukan dengan menjaga imunitas melalui penerapan gaya hidup sehat, seperti mengonsumsi makanan bergizi seimbang dan melakukan aktivitas fisik secara rutin (da Silveira, M. P., 2021; Pertiwi et al., 2020). Selain itu, pemanfaatan obat tradisional berbahan alami telah lama dilakukan untuk menjaga kesehatan dan selama pandemi digunakan sebagai salah satu langkah pencegahan, terutama karena beberapa tanaman mengandung antioksidan yang dapat mendukung sistem imun (Ermawati et al., 2022).

Pengetahuan mengenai pemanfaatan tanaman sebagai obat merupakan bagian dari warisan budaya masyarakat Indonesia yang berkembang berdasarkan pengalaman, pengetahuan, serta keterampilan yang diwariskan secara turun-temurun. Sebagai komponen utama dalam pengobatan tradisional, tanaman obat mengandung berbagai senyawa yang berperan sebagai imunomodulator, membantu meredakan gejala, serta mendukung penanganan penyakit penyerta (komorbid) pada COVID-19. Namun demikian, efektivitas langsungnya sebagai agen antivirus terhadap virus penyebab COVID-19 masih belum dapat dipastikan dan memerlukan penelitian lebih lanjut (Saima Perdani et al., 2021). Salah satu tanaman obat yang banyak dimanfaatkan di Indonesia dan memiliki potensi sebagai sumber senyawa bioaktif adalah tanaman gambir (*Uncaria gambir*) (Khoirul Rista Abidin, 2026).

Tanaman gambir (*Uncaria gambir*) adalah tumbuhan khas Asia Tenggara, termasuk Indonesia, yang sejak lama dikenal memiliki beragam manfaat. Secara turun-temurun, gambir digunakan sebagai obat tradisional serta menjadi bagian dari budaya menyirih di masyarakat Sumatra, Kalimantan, dan beberapa wilayah lainnya. Selain itu, gambir juga memiliki nilai

ekonomi yang cukup tinggi dan menjadi salah satu komoditas perdagangan penting bagi masyarakat lokal. Tanaman ini mengandung senyawa aktif seperti katekin dan tanin yang memberikan berbagai manfaat bagi kesehatan. Katekin dikenal memiliki aktivitas antioksidan yang kuat serta bersifat antiinflamasi dan antibakteri, sedangkan tanin memiliki sifat astringen yang dapat membantu mempercepat penyembuhan luka dan mengatasi infeksi. Gambir juga termasuk tanaman penghasil resin yang banyak dimanfaatkan dalam bidang industri dan farmasi, serta digunakan sebagai obat antidiare dan untuk mengatasi gangguan pencernaan. Seiring perkembangannya, pemanfaatan gambir semakin beragam, tidak hanya dalam pengobatan tradisional tetapi juga sebagai bahan baku industri farmasi, perekat, pewarna batik, campuran minuman, serta dalam proses penyamakan kulit (Silvianti & Arsih, 2024).

Gambir merupakan tanaman perdu yang termasuk dalam famili Rubiaceae dan dapat tumbuh optimal hingga ketinggian sekitar  $\pm 900$  mdpl, dengan curah hujan 2.500–3.000 mm serta paparan sinar matahari yang cukup, tetapi tidak tahan terhadap kondisi tanah yang tergenang air (Yeni, 2017). Di Indonesia, gambir digunakan sebagai bahan dalam tradisi menyirih serta sebagai obat tradisional untuk berbagai penyakit, seperti luka, diare, dan penyakit kulit, serta dimanfaatkan sebagai obat kumur dan pewarna tekstil (Deswati et al., 2022). Tanaman ini mengandung senyawa polifenol, terutama flavonoid, yang berpotensi sebagai antioksidan, dengan komponen utama seperti quercetin, katekin, dan asam tanat. Katekin dapat mengalami perubahan menjadi senyawa yang bersifat astringen atau pahit akibat pemanasan atau kondisi basa. Namun, pemanfaatan gambir sebagai sumber antioksidan masih belum maksimal karena keterbatasan pengetahuan terkait metode ekstraksi yang tepat (Rahmawati & Yuniarti, 2024).

Penelitian terkait pemanfaatan senyawa alami sebagai kandidat antivirus berbasis *in silico* terus mengalami perkembangan, khususnya melalui pendekatan *molecular docking* untuk memprediksi interaksi antara ligan dan protein target virus. Beberapa studi sebelumnya menunjukkan bahwa metode *molecular docking* dapat dimanfaatkan untuk menilai afinitas serta kestabilan interaksi senyawa alami terhadap protein target pada penyakit tertentu (Attique et al., 2019). Di sisi lain, tanaman gambir (*Uncaria gambir*) diketahui mengandung berbagai senyawa bioaktif yang berpotensi sebagai antioksidan dan antibakteri (Rahmawati & Yuniarti, 2024). Namun, penelitian yang secara khusus membahas potensi senyawa aktif gambir, seperti limonene dan linalool, terhadap protein SARS-CoV-2 dengan kode PDB ID: 7Q5F masih tergolong terbatas.

Berdasarkan kondisi tersebut, penelitian ini dilakukan untuk mengkaji interaksi senyawa limonene dan linalool terhadap protein SARS-CoV-2 (PDB ID: 7Q5F) menggunakan metode *molecular docking*. Kebaruan penelitian ini terletak pada pemanfaatan protein target 7Q5F untuk mengevaluasi potensi senyawa aktif dari gambir melalui pendekatan *in silico* dengan bantuan perangkat lunak MOE 2022. Penelitian ini juga menitikberatkan pada perbandingan kestabilan interaksi antara limonene dan linalool terhadap protein target berdasarkan parameter S-score dan RMSD. Pendekatan tersebut diharapkan dapat memberikan informasi awal mengenai senyawa yang memiliki potensi interaksi paling stabil sebagai kandidat antivirus alami terhadap SARS-CoV-2.

## METODE

Penelitian ini merupakan studi komputasional berbasis *in silico* dengan pendekatan deskriptif kuantitatif yang menggunakan metode *molecular docking*. Penelitian dilakukan untuk menganalisis interaksi antara senyawa aktif dari gambir, yaitu limonene dan linalool, dengan protein SARS-CoV-2 berkode PDB ID: 7Q5F. Seluruh tahapan, mulai dari preparasi protein, preparasi ligan, hingga simulasi docking, dilakukan menggunakan perangkat lunak MOE 2022. Struktur protein diperoleh dari *Protein Data Bank* (PDB), sedangkan struktur ligan diambil dari basis data PubChem. Analisis hasil dilakukan berdasarkan parameter energi ikatan (S-score) dan *Root Mean Square Deviation* (RMSD) untuk menilai kestabilan interaksi antara ligan dan protein.

### 1. Preparasi Protein dan Ligan

Reseptor protein yang digunakan dalam penelitian ini adalah protein Coronavirus dengan kode PDB ID: 7Q5F. Preparasi reseptor dilakukan menggunakan perangkat lunak MOE 2022, kemudian dilakukan proses minimisasi energi dengan metode QuickPrep, dengan parameter konvergensi energi yang ditetapkan pada nilai *root mean square* (RMS) slope sebesar  $0,01 \text{ kcal/mol/\AA}^2$ .

Pada tahap simulasi *molecular docking*, digunakan ligan berupa senyawa katekin yang merupakan produk alami dari gambir. Struktur ligan diperoleh dari basis data PubChem (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>) dan selanjutnya diproses menggunakan MOE 2022. Setelah itu, dilakukan pembuatan basis data ligan dengan bantuan perangkat lunak yang sama. Selama proses ini, sistem secara otomatis menghilangkan atom yang tidak diperlukan serta menambahkan atom hidrogen secara eksplisit. Muatan parsial kemudian disesuaikan dengan

kondisi fase gas, dan dilakukan koreksi terhadap elektron hidrogen serta pasangan elektron bebas apabila diperlukan. Proses minimisasi energi pada ligan juga menggunakan parameter RMS slope sebesar 0,01 kcal/mol/Å<sup>2</sup>.

Proses *molecular docking* dilakukan menggunakan fitur *docking* pada perangkat lunak MOE 2022 dengan menempatkan ligan pada sisi aktif protein target. Selama proses tersebut, sistem menghasilkan beberapa pose interaksi yang selanjutnya dievaluasi berdasarkan nilai energi ikatan (S-score) dan *Root Mean Square Deviation* (RMSD). Pose yang memiliki nilai energi paling rendah dan RMSD terkecil dipilih sebagai hasil docking terbaik karena menunjukkan interaksi yang lebih stabil antara ligan dan protein target.

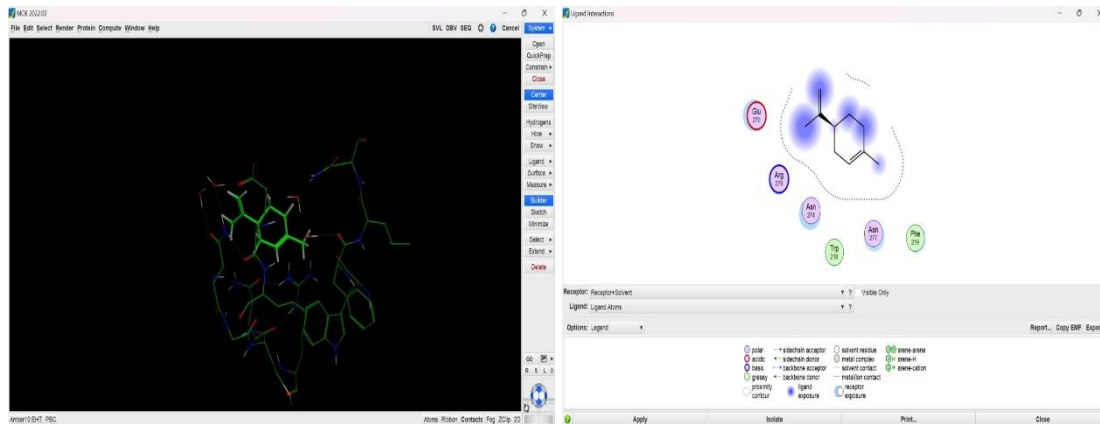
## 2. Analisis *Docking*

Hasil *docking* dianalisis berdasarkan nilai *Root Mean Square Deviation* (RMSD) dan energi bebas ikatan (S-score). Nilai S-score digunakan sebagai parameter yang mencerminkan keseluruhan interaksi antara ligan dan reseptor protein, termasuk ikatan hidrogen, gaya van der Waals, interaksi elektrostatik, serta interaksi dengan pelarut. Semakin besar nilai negatif S-score yang diperoleh, maka semakin tinggi pula afinitas ikatan antara ligan dan reseptor protein tersebut (Attique et al., 2019; Fatima et al., 2022; Khelifaoui et al., 2021).

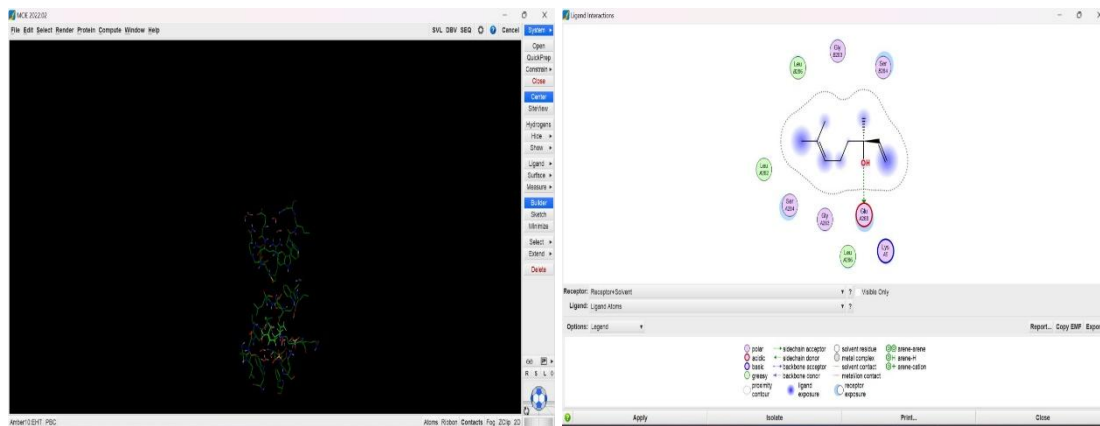
*Root Mean Square Deviation* (RMSD) merupakan parameter yang digunakan untuk menilai tingkat kemiripan antara konformasi hasil *docking* dengan konformasi referensi, atau antar konformasi hasil *docking* itu sendiri. Nilai RMSD yang mendekati atau berada di bawah 3 Å menunjukkan bahwa metode *docking* yang digunakan masih dapat menghasilkan posisi ligan yang masih dapat diterima dan mendekati konformasi referensi (Attique et al., 2019; Ramírez & Caballero, 2018).

Validasi hasil *docking* dilakukan dengan menilai nilai RMSD dari pose ligan terhadap struktur referensi. Nilai RMSD yang mendekati atau berada di bawah 3 Å menunjukkan bahwa metode docking yang digunakan dapat menghasilkan posisi ligan yang dapat diterima dan mendekati konformasi referensi. Dengan demikian, parameter RMSD digunakan sebagai indikator untuk mengevaluasi kestabilan dan keakuratan interaksi antara ligan dan protein target.

## HASIL



Gambar 1. Struktur molekul dan hasil *docking* senyawa limonene terhadap protein SARS-CoV-2 (PDB ID: 7Q5F)



Gambar 2. Struktur molekul dan hasil *docking* senyawa linalool terhadap protein SARS-CoV-2 (PDB ID: 7Q5F)

**Tabel 1. Hasil analisis molecular docking senyawa limonene dan linalool terhadap protein 7Q5F**

Senyawa	MSEQ	S-score (kcal/mol)	RMSD (Å)
Limonene	2	-4.04144669	3.12917566
Linalool	3	-4.48346758	0.788530588

Tabel di atas menyajikan hasil analisis perbandingan antara dua senyawa organik, yaitu limonene dan linalool. Analisis ini tampaknya menggunakan suatu model atau metode tertentu yang menghasilkan beberapa parameter numerik untuk menggambarkan karakteristik kedua senyawa tersebut.

o Nama senyawa: Kolom ini menunjukkan identitas molekul yang dianalisis, yaitu limonene dan linalool. Kedua senyawa ini merupakan komponen umum dalam minyak atsiri dari berbagai tanaman serta memiliki struktur kimia yang mirip namun tidak sama.

o S: Nilai pada kolom ini merupakan hasil perhitungan statistik atau skor yang berkaitan dengan kesesuaian model terhadap data. S-score merupakan parameter yang menunjukkan kekuatan afinitas ikatan antara ligan dan protein target. Semakin negatif nilai S-score, maka semakin kuat dan stabil interaksi yang terbentuk antara ligan dan protein.

o RMSD: Merupakan singkatan dari *Root Mean Square Deviation*. Parameter ini sering digunakan dalam analisis struktur molekul untuk mengukur tingkat perbedaan antara struktur molekul hasil perhitungan dengan struktur referensi. Nilai RMSD yang lebih kecil menunjukkan bahwa struktur yang dihitung lebih mendekati struktur acuan. Dalam hal ini, nilai RMSD linalool yang jauh lebih kecil dibandingkan limonene menunjukkan bahwa struktur linalool yang dihasilkan oleh model lebih sesuai atau lebih dekat dengan struktur referensi yang digunakan.

Interpretasi umum:

o Model analisis yang digunakan memberikan skor atau peringkat yang berbeda antara limonene dan linalool, di mana linalool memiliki nilai MSEQ yang lebih tinggi. Hal ini dapat menunjukkan bahwa struktur linalool lebih kompleks atau memiliki lebih banyak interaksi dalam model yang digunakan.

o Nilai S yang negatif pada kedua senyawa menunjukkan adanya kemungkinan hubungan terbalik antara variabel yang diukur dengan parameter lain dalam model.

o Struktur linalool yang dihasilkan oleh model lebih mendekati struktur referensi dibandingkan limonene, yang ditunjukkan oleh nilai RMSD yang jauh lebih rendah.

Berdasarkan hasil *docking*, linalool memiliki nilai S-score yang lebih rendah dibandingkan limonene, yang menunjukkan afinitas ikatan yang lebih baik terhadap protein target. Selain itu, nilai RMSD linalool berada di bawah 3 Å, sehingga menandakan bahwa interaksi antara ligan dan protein lebih stabil serta mendekati konformasi referensi. Sebaliknya, limonene menunjukkan nilai RMSD yang lebih tinggi, sehingga kestabilan interaksinya lebih rendah dibandingkan linalool.

## PEMBAHASAN

Analisis *molecular docking* terhadap senyawa limonene dan linalool pada protein SARS-CoV-2 (PDB ID: 7Q5F) dilakukan untuk menilai potensi keduanya sebagai agen antivirus. Evaluasi hasil dilakukan berdasarkan nilai energi bebas ikatan (S-score) dan *Root Mean Square*

*Deviation* (RMSD), yang merupakan parameter umum dalam studi *docking* molekuler untuk menentukan kekuatan serta kestabilan interaksi antara ligan dan protein.

Berdasarkan hasil *docking*, linalool menunjukkan afinitas ikatan yang lebih baik dibandingkan limonene, yang ditunjukkan oleh nilai S-score yang lebih negatif. Dalam studi *molecular docking*, nilai energi ikatan yang semakin negatif mencerminkan interaksi yang lebih kuat antara ligan dan protein target. Hal ini mengindikasikan bahwa linalool memiliki potensi yang lebih tinggi untuk berikatan secara efektif pada sisi aktif protein SARS-CoV-2.

Selain afinitas ikatan, kestabilan struktur juga dievaluasi menggunakan nilai RMSD. Parameter RMSD umumnya digunakan untuk mengukur penyimpangan posisi ligan serta menilai tingkat akurasi dan stabilitas hasil *docking* (Tan, 2024). Nilai RMSD yang lebih rendah menunjukkan kompleks ligan–protein yang lebih stabil, sedangkan nilai yang lebih tinggi menandakan ketidakstabilan struktur. Oleh karena itu, nilai RMSD linalool yang lebih rendah dibandingkan limonene menunjukkan bahwa interaksinya lebih stabil.

Perbedaan interaksi antara kedua senyawa tersebut kemungkinan disebabkan oleh perbedaan struktur kimianya. Linalool memiliki gugus hidroksil (-OH) yang dapat memfasilitasi pembentukan ikatan hidrogen, sedangkan limonene tidak memiliki gugus fungsi polar. Berbagai jenis interaksi, seperti ikatan hidrogen, gaya van der Waals, dan interaksi hidrofobik, berperan dalam menentukan kestabilan ikatan. Namun, hasil *molecular docking* hanya memberikan prediksi awal, sehingga diperlukan validasi lebih lanjut melalui simulasi dinamika molekuler untuk memastikan kestabilan dan aktivitas biologisnya.

Hasil penelitian ini sesuai dengan beberapa penelitian sebelumnya yang menunjukkan bahwa senyawa alami yang memiliki gugus fungsi polar cenderung mempunyai kemampuan interaksi yang lebih baik terhadap protein target dibandingkan senyawa nonpolar. Adanya gugus hidroksil (-OH) pada linalool memungkinkan terbentuknya ikatan hidrogen yang dapat meningkatkan kestabilan kompleks ligan–protein. Dalam studi *molecular docking*, interaksi ikatan hidrogen diketahui berperan penting dalam meningkatkan afinitas ikatan serta kestabilan konformasi ligan pada sisi aktif protein target (Khelifaoui et al., 2021). Oleh sebab itu, nilai RMSD yang rendah dan S-score yang lebih negatif pada linalool menunjukkan bahwa senyawa tersebut memiliki potensi yang lebih baik sebagai kandidat inhibitor terhadap protein SARS-CoV-2 dibandingkan limonene.

## KESIMPULAN

Analisis *molecular docking* menunjukkan bahwa linalool memiliki afinitas ikatan dan kestabilan interaksi yang lebih baik terhadap protein SARS-CoV-2 (PDB ID: 7Q5F) dibandingkan limonene, yang ditunjukkan oleh nilai S-score yang lebih negatif serta RMSD yang lebih rendah. Hasil tersebut mengindikasikan bahwa linalool berpotensi menjadi kandidat inhibitor alami terhadap protein target SARS-CoV-2. Penelitian ini memberikan gambaran awal mengenai potensi senyawa aktif dari gambir sebagai kandidat antivirus berbasis *in silico*. Namun, penelitian lebih lanjut melalui simulasi dinamika molekuler serta pengujian *in vitro* dan *in vivo* masih diperlukan untuk memastikan efektivitas dan aktivitas biologisnya.

## DAFTAR PUSTAKA

- Abidin, K. R., Nurhidayatulloh, A., Siregar, F., Dermawan, A. M., Dwisari, F., Oktaviria, O., Suchi, S., Indriani, M., Putri, F. A., Prasetyaningsi, H., & Shofia, S. (2026). Formulation and characterization of *Uncaria gambir* (*U. gambir*) extract cream as an anti-psoriasis candidate: In silico and in vitro studies. *Indonesian Journal of Chemical Research*, 13(3), 250–261. <https://doi.org/10.30598/ijcr.2026.13-kho>
- Attique, S. A., Hassan, M., Usman, M., Atif, R. M., Mahboob, S., Al-Ghanim, K. A., Bilal, M., & Nawaz, M. Z. (2019). A molecular docking approach to evaluate the pharmacological properties of natural and synthetic treatment candidates for use against hypertension. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 16(6), Article 923. <https://doi.org/10.3390/ijerph16060923>
- da Silveira, M. P., da Silva Fagundes, K. K., Bizuti, M. R., Starck, É., Rossi, R. C., & de Resende e Silva, D. T. (2021). Physical exercise as a tool to help the immune system against COVID-19: An integrative review of the current literature. *Clinical and Experimental Medicine*, 21(1), 15–28. <https://doi.org/10.1007/s10238-020-00650-3>
- Deswati, Tika, A., & Nadhifa, P. S. (2022). Manfaat antioksidan dari tanaman gambir (*Uncaria gambir* Roxb.) untuk kesehatan, kosmetik, dan pangan. *'Afiyah*, 9(2), 6–13. <https://www.ejournal.umnyarsi.ac.id/index.php/JAV1N1/article/viewFile/231/282>
- Dewi, Y. K., & Riyandari, B. A. (2020). Potensi Tanaman Lokal sebagai Tanaman Obat dalam Menghambat Penyebaran COVID-19. *Jurnal Pharmascience*, 7(2), 112–128. <https://doi.org/10.20527/jps.v7i2.8793>
- Ermawati, N., Oktaviani, N., & Abab, M. U. (2022). Edukasi Pemanfaatan Tanaman Obat Tradisional dalam Rangka Self Medication di Masa Pandemi COVID-19. *ABDI MOESTOPO: Jurnal Pengabdian pada Masyarakat*, 5(2), 148–156. <https://doi.org/10.32509/abdimoestopo.v5i2.1797>
- Fatima, I., Ihsan, H., Masoud, M. S., Kalsoom, S., Aslam, S., Rehman, A., Ashfaq, U. A., & Qasim, M. (2022). Screening of drug candidates against Endothelin-1 to treat hypertension using computational based approaches: Molecular docking and

- dynamics simulation [Retracted article]. *PLOS ONE*, 17(8), Article e0269739. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0269739>
- Huang, C., Wang, Y., Li, X., Ren, L., Zhao, J., Hu, Y., Zhang, L., Fan, G., Xu, J., Gu, X., Cheng, Z., Yu, T., Xia, J., Wei, Y., Wu, W., Xie, X., Yin, W., Li, H., Liu, M., ... Cao, B. (2020). Clinical features of patients infected with 2019 novel coronavirus in Wuhan, China. *The Lancet*, 395(10223), 497–506. [https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(20\)30183-5](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(20)30183-5)
- Khelfaoui, H., Harkati, D., & Saleh, B. A. (2021). Molecular docking, molecular dynamics simulations and reactivity, studies on approved drugs library targeting ACE2 and SARS-CoV-2 binding with ACE2. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, 39(18), 7246–7262. <https://doi.org/10.1080/07391102.2020.1803967>
- Nugraha, A. S., Agustina, R. P., Mirza, S., Rani, D. M., Winarto, N. B., Triatmoko, B., Pratama, A. N. W., Keller, P. A., & Wangchuk, P. (2022). Phytochemistry and pharmacology of medicinal plants used by the Tenggerese society in Java Island of Indonesia. *Molecules*, 27(21), Article 7532. <https://doi.org/10.3390/molecules27217532>
- Pakpahan, R., & Fitriani, Y. (2020). Analisa Pemanfaatan Teknologi Informasi dalam Pembelajaran Jarak Jauh di Tengah Pandemi Virus Corona COVID-19. *JISAMAR: Journal of Information System, Applied, Management, Accounting and Research*, 4(2), 30–36. <https://journal.stmikjayakarta.ac.id/index.php/jisamar/article/view/181>
- Perdani, M. S., & Hasibuan, A. K. (2021). Analisis Informasi Tanaman Herbal melalui Media Sosial di Tengah Masyarakat pada Pandemi COVID-19: Sebuah Tinjauan Literatur. *Bencoolen Journal of Pharmacy*, 1(1), 11–25. <https://doi.org/10.33369/bjp.v1i1.15589>
- Pertiwi, R., Notriawan, D., & Wibowo, R. H. (2020). Pemanfaatan Tanaman Obat Keluarga (TOGA) Meningkatkan Imunitas Tubuh sebagai Pencegahan COVID-19. *Dharma Raflesia: Jurnal Ilmiah Pengembangan dan Penerapan IPTEKS*, 18(2), 110–118. <https://doi.org/10.33369/dr.v18i2.12665>
- Rahmawati, A. A., & Yuniarti, E. (2024). Literature article review: Gambir plant (*Uncaria gambir* Roxb.) as antioxidant producer. *Jurnal Serambi Biologi*, 9(1), 57–63. <https://doi.org/10.24036/srmb.v9i1.316>
- Ramírez, D., & Caballero, J. (2018). Is it reliable to take the molecular docking top scoring position as the best solution without considering available structural data? *Molecules*, 23(5), Article 1038. <https://doi.org/10.3390/molecules23051038>
- Silvianti, M., & Arsih, F. (2024). Validitas Kearifan Lokal Masyarakat Pangkalan Koto Baru, Kabupaten Lima Puluh Kota dalam Pemanfaatan Tanaman Gambir sebagai Obat Tradisional. *Bioedutech: Jurnal Biologi, Pendidikan Biologi, dan Teknologi Pembelajaran Biologi*, 3(1), 36–49. <https://jurnal.anfa.co.id/index.php/biologi/article/view/1174>
- Siregar, R. S., Hadiguna, R. A., Kamil, I., Nazir, N., & Nofaldi, N. (2020). Permintaan dan Penawaran Tanaman Obat Tradisional di Provinsi Sumatera Utara. *Jurnal Tumbuhan Obat Indonesia*, 13(1), 50–60. <https://doi.org/10.22435/jtoi.v13i1.2037>
- Siregar, R. S., Tanjung, A. F., Siregar, A. F., Salsabila, S., Bangun, I. H., & Mulya, M. O. (2021). Studi Literatur tentang Pemanfaatan Tanaman Obat Tradisional. *Scenario: Seminar of Social Sciences Engineering and Humaniora*, 385–391. <https://jurnal.pancabudi.ac.id/index.php/scenario/article/view/1210>

- Tan, L. H., Kwoh, C. K., & Mu, Y. (2024). RmsdXNA: RMSD prediction of nucleic acid-ligand docking poses using machine-learning method. *Briefings in Bioinformatics*, 25(3), Article bbae166. <https://doi.org/10.1093/bib/bbae166>
- Yeni, G., Syamsu, K., Mardiyati, E., & Muchtar, H. (2017). Penentuan Teknologi Proses Pembuatan Gambir Murni dan Katekin Terstandar dari Gambir Asalan. *Jurnal Litbang Industri*, 7(1), 1–10. <https://doi.org/10.24960/jli.v7i1.2846.1-10>