

**PEVA FAUZIAH NOOR**

**STUDI FARMAKOFOR DAN PENAMBATAN MOLEKUL  
SENYAWA FLAVONOID TERHADAP RESEPTOR  
CYCLOOXYGENASE-2 (COX-2) SEBAGAI ANTIINFLAMASI**



**PROGRAM STUDI S1 FARMASI  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS GARUT  
2022**

**LEMBAR PENGESAHAN**

**PROGRAM STUDI S1 FARMASI  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS GARUT**

**DEKAN**



**dr. Siva Hamdani, MARS., M.Farm**

**STUDI FARMAKOFOR DAN PENAMBATAN MOLEKUL  
SENYAWA FLAVONOID TERHADAP RESEPTOR  
CYCLOOXYGENASE-2 (COX-2) SEBAGAI ANTIINFLAMASI**

**TUGAS AKHIR**

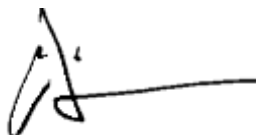
Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar  
Sarjana Farmasi pada Program Studi S1 Farmasi  
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam,  
Universitas Garut

Garut, November 2022

Oleh :

**Peva Fauziah Noor**  
**24041118034**

Disetujui oleh:



**Prof. apt. Muchtaridi, Ph.D**  
Pembimbing Utama



**Dr. apt. Riska Prasetiawati, M.Si**  
Pembimbing Serta



Kutipan atau saduran, baik sebagian maupun seluruh naskah ini, harus menyebutkan nama pengarang dan sumber aslinya, yaitu Program Studi S1 Farmasi, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Garut.

## DEKLARASI

Dengan ini menyatakan bahwa buku tugas akhir dengan judul **“STUDI FARMAKOFOR DAN PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA FLAVONOID TERHADAP RESEPTOR CYCLOOXYGENASE-2 (COX-2) SEBAGAI ANTIINFLAMASI”** ini beserta seluruh isinya adalah benar-benar karya saya sendiri dan saya tidak melakukan penjiplakan atau pengutipan dengan cara-cara yang tidak sesuai dengan etika keilmuan yang tidak berlaku dengan masyarakat keilmuan. Atas pernyataan ini, saya siap menanggung risiko/sanksi yang dijatuhkan kepada saya apabila kemudian ditemukan pelanggaran terhadap etika keilmuan dalam karya ini, atau ada klaim dari pihak lain terhadap keaslian karya saya ini.

Garut, November 2022

Yang membuat pernyataan

Tertanda



**PEVA FAUZIAH NOOR**

# STUDI FARMAKOFOR DAN PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA FLAVONOID TERHADAP RESEPTOR *CYCLOOXYGENASE-2 (COX-2)* SEBAGAI ANTIINFLAMASI

Peva Fauziah Noor

24041118034

## ABSTRAK

Inflamasi merupakan mekanisme pertahanan tubuh terhadap adanya cedera dan gangguan oleh faktor eksternal. Rasa sakit, panas, kemerahan, bengkak, dan gangguan fungsi merupakan tanda terjadinya inflamasi. Cyclooxygenase-2 merupakan salah satu target kerja dari inflamasi. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui potensi senyawa flavonoid sebagai antiinflamasi dalam menghambat kinerja COX-2 melalui identifikasi farmakofor, *molecular docking*, prediksi *druglikeness*, prediksi farmakokinetika serta prediksi toksisitas menggunakan alat berbantu komputasi yaitu perangkat lunak *LigandScout 4.4.5*<sup>®</sup>, *Discovery Studio Visualizer*<sup>®</sup>, *AutoDock Tools 1.5.6*<sup>®</sup>, *Pre-ADMET*, dan *Toxtree 2.6.13*<sup>®</sup>. Analisis validasi skrining farmakofor senyawa flavonoid memiliki nilai AUC 83%, EF 1,9, dan 54 senyawa hits sedangkan pada validasi *molecular docking* menggunakan reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 memiliki nilai RMSD 1,383Å dan  $\Delta G$  -7,18 kkal/mol. Hasil identifikasi dari 80 senyawa flavonoid terdapat dua senyawa aktif yang dapat dijadikan sebagai senyawa pemandu yaitu fustin dan luteolin yang memiliki nilai *fit score* 45,29% dan 44,31%, nilai  $\Delta G$  -8,31 kkal/mol dan -8,26 kkal/mol dengan residu asam amino Tyr341 dan Tyr 371 yang sama dengan *native* ligan. Senyawa fustin dan luteolin memiliki prediksi *druglikeness* dan prediksi toksisitas yang baik, sedangkan pada prediksi farmakokinetik senyawa fustin distribusinya kurang baik.

Kata kunci: flavonoid, COX-2, inflamasi, skrining farmakofor, penambatan molekul

**STUDY OF PHARMACOPHORE AND MOLECULAR DOCKING  
OF FLAVONOID COMPOUNDS ON CYCLOOXYGENASE-2  
(COX-2) RECEPTORS AS ANTIINFLAMMATORY**

Peva Fauziah Noor

24041118034

**ABSTRACT**

*Inflammation is the body's defense mechanism against injury and interference by external factors. Pain, heat, redness, swelling, and impaired function are signs of inflammation. Cyclooxygenase-2 is one of the targets of inflammation. This study aimed to determine the potential of flavonoid compounds as anti-inflammatory in inhibiting COX-2 performance through pharmacophore identification, molecular docking, drug likeness prediction, pharmacokinetic prediction and toxicity prediction using computational-assisted tools, namely LigandScout 4.4.5® software, Discovery Studio Visualizer®, AutoDock Tools 1.5.6®, Pre-ADMET, and Toxtree 2.6.13®. The pharmacophore screening validation analysis of flavonoid compounds had AUC values of 83%, EF 1.9, and 54 compounds hits, while the molecular docking validation using COX-2 ID PDB 3LN0 receptors had RMSD values of 1.383Å and  $\Delta G$  -7.18 kcal/mol. The results of the identification of 80 flavonoid compounds contained two active compounds that could be used as guide compounds, namely fustin and luteolin which had fit scores of 45.29% and 44.31%,  $\Delta G$  values -8.31 kcal/mol and -8.26 kcal/mol with the same Tyr341 and Tyr 371 amino acid residues as the native ligand. Fustin and luteolin compounds have good predictive drug likeness and toxicity prediction, while the distribution of fustin compounds in pharmacokinetic predictions is not good.*

*Keywords: flavonoids, COX-2, inflammation, pharmacophore screening, molecular docking*

## KATA PENGANTAR

Alhamdulillah, puji dan syukur penulis panjatkan kehadirat Allah SWT, karena berkat rahmat dan hidayah-Nya penulis dapat menyelesaikan buku tugas akhir yang berjudul: **STUDI FARMAKOFOR DAN PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA FLAVONOID TERHADAP RESEPTOR *CYCLOOXYGENASE-2* (COX-2) SEBAGAI ANTIINFLAMASI** yang merupakan salah satu persyaratan untuk memperoleh gelar sarjana pada program Studi S1 Farmasi Matematika dan Ilmu pengetahuan Alam Universitas Garut.

Penulis menyadari bahwa selesainya penyusunan Tugas Akhir ini tidak terlepas dari bantuan berbagai pihak, baik bantuan moril maupun material. Pada kesempatan ini saya mengucapkan rasa hormat dan terimakasih sebesar-besarnya kepada:

1. Ibu dr. Siva Hamdani., MARS., M. Farm selaku Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Garut.
2. Bapak Prof. apt. Muchtaridi, Ph.D selaku dosen pembimbing utama yang telah dengan sabar membimbing dan memberikan banyak masukan serta meluangkan waktunya untuk membimbing penyusun Tugas Akhir.
3. Ibu Dr. apt. Riska Prasetiawati, M.Si selaku dosen pembimbing serta yang telah dengan sabar membimbing dan memberikan banyak masukan serta meluangkan waktunya untuk membimbing penyusun Tugas Akhir.

4. Seluruh dosen pengajar, akademik, dan perpustakaan FMIPA Universitas Garut Khususnya yang telah memberikan ilmu bermanfaat sehingga turut membantu dalam penyusunan Tugas Akhir.
5. Orang tua tercinta yang selalu mendoakan, memberikan kasih sayang, pengertian, dukungan, materi dan motivasi kepada saya selama menempuh pendidikan di Universitas Garut, sehingga terselesainya penyusunan Tugas Akhir.
6. Teman-teman angkatan 2018 yang sama-sama berjuang dalam menyelesaikan tugas akhir.
7. Serta seluruh pihak yang tidak bisa saya sebutkan satu-persatu, yang senantiasa memberikan bantuan untuk dapat menyelesaikan Tugas Akhir.

Semoga Allah SWT melimpahkan rahmat-Nya kepada semua pihak yang sudah membantu. Penulis menyadari, bahwa tugas akhir ini masih jauh dari sempurna, untuk itu penulis mengharapkan kritik dan saran yang membangun untuk kesempurnaan penulisan selanjutnya. Semoga buku Tugas Akhir ini dapat bermanfaat bagi penulis maupun pihak yang berkepentingan.

## DAFTAR ISI

	Halaman
KATA PENGANTAR .....	i
DAFTAR ISI.....	iii
DAFTAR LAMPIRAN.....	v
DAFTAR TABEL.....	vi
DAFTAR GAMBAR .....	vii
<b>BAB</b>	
I     PENDAHULUAN .....	1
II    TINJAUAN PUSTAKA.....	4
2.1 Flavonoid.....	4
2.2 Inflamasi.....	9
2.3 Reseptor.....	12
2.4 Interaksi Ikatan Kimia dan Struktur Biologis .....	13
2.5 Computer Aided Drug Discovery (CADD) .....	14
2.6 Skrining Farmakofor .....	15
2.7 Penambatan Molekul ( <i>Molecular Docking</i> ).....	16
2.8 Lipinski's Rule of Five.....	16
2.9 Program Komputasi.....	17
III   METODE PENELITIAN.....	20

IV	PENELITIAN .....	22
	4.1 Alat .....	22
	4.2 Bahan.....	22
	4.3 Prosedur Penelitian.....	23
V	HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN .....	28
	5.1 Skrining Farmakofor .....	28
	5.2 Penambatan Molekul (Molecular Docking).....	31
	5.3 Prediksi Druglikeness .....	43
	5.4 Prediksi Farmakokinetik .....	44
	5.5 Prediksi Toksisitas .....	45
VI	SIMPULAN DAN SARAN .....	47
	6.1 Simpulan .....	47
	6.2 Saran .....	47
	DAFTAR PUSTAKA .....	48
	LAMPIRAN.....	52

## DAFTAR LAMPIRAN

LAMPIRAN		Halaman
1	SENYAWA FLAVONOID DAN SUMBERNYA .....	52
2	ALUR PENELITIAN SKRINING FARMAKOFOR.....	56
3	ALUR PENELITIAN MOLECULAR DOCKING .....	57
4	ALUR PENELITIAN PREDIKSI DRUGLIKENESS DAN FARMAKOKINETIK.....	58
5	ALUR PENELITIAN PREDIKSI TOKSISITAS .....	59
6	SITUS DAN APLIKASI.....	60
7	STRUKTUR 2D DAN 3D SENYAWA FLAVONOID.....	66
8	STRUKTUR 3D MAKROMOLEKUL .....	83
9	HASIL PENELITIAN SKRINING FARMAKOFOR.....	84
10	VISUALISASI 2D DAN 3D SKRINING FARMAKOFOR..	88
11	HASIL PENELITIAN MOLECULAR DOCKING .....	90
12	VISUALISASI 2D DAN 3D RESIDU ASAM AMINO .....	102
13	HASIL PENELITIAN PREDIKSI DRUGLIKENESS .....	140
14	HASIL PENELITIAN PREDIKSI FARMAKOKINETIK ....	144
15	HASIL PENELITIAN PREDIKSI TOKSISITAS.....	148

## DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
V.1 Model Farmakofor Metode Skrining Farmakofor.....	29
V.2 Hasil Validasi Model Farmakofor.....	30
V.3 Makromolekul Hasil Preparasi.....	32
VII.1 Daftar Senyawa Flavonoid dan Sumbernya.....	52
VII.2 Struktur 2D dan 3D Senyawa Flavonoid.....	66
VII.3 Hasil Penelitian Skrining Farmakofor.....	84
VII.4 Hasil Penelitian Simulasi <i>Molecular Docking</i> .....	90
VII.5 Hasil Penelitian Prediksi <i>Druglikeness</i> .....	140
VII.6 Hasil Penelitian Prediksi Farmakokinetik.....	144
VII.7 Hasil Penelitian Prediksi Toksisitas.....	148

## DAFTAR GAMBAR

Gambar		Halaman
II.1	Struktur Flavonoid .....	4
II.2	Struktur kerangka Flavon .....	5
II.3	Struktur kerangka Flavonol.....	5
II.4	Struktur kerangka Flavanon.....	6
II.5	Struktur kerangka Isoflavonoid.....	7
II.6	Struktur kerangka Biflavonoid.....	7
II.7	Struktur kerangka Dehidroflavonol .....	8
II.8	Struktur kerangka Auran.....	8
II.9	Struktur kerangka Antosianidin .....	8
II.10	Struktur kerangka Kalkon .....	9
V.1	Hasil skrining farmakofor pada reseptor COX-2.....	28
V.2	Grid-box ID PDB 3LN0.....	33
V.3	Hasil validasi metode <i>molecular docking</i> .....	34
V.4	Visualisasi tumpang tindih ligan alami 3LN0 (merah-abu-biru) dengan hasil redocking (kuning).....	34
V.5	Visualisasi residu asam amino <i>native</i> ligan terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	35
V.6	Visualisasi residu asam amino Etoricoxib terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	36
V.7	Visualisasi residu asam amino senyawa Fustin terhadap	

	reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	37
V.8	Visualisasi residu asam amino senyawa Luteolin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	37
V.9	Visualisasi residu asam amino senyawa Robinetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	38
V.10	Visualisasi residu asam amino senyawa Acacetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	39
V.11	Visualisasi residu asam amino senyawa Isoliquiritigenin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	39
V.12	Visualisasi residu asam amino senyawa Scutellarein terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	40
V.13	Visualisasi residu asam amino senyawa Diosmetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	41
V.14	Visualisasi residu asam amino senyawa Hesperetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	41
V.15	Visualisasi residu asam amino senyawa Sakuranetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	42
VII.1	Alur penelitian simulasi skrining farmakofor.....	56
VII.2	Alur penelitian <i>molecular docking</i> .....	57
VII.3	Alur prediksi <i>druglikeness</i> menggunakan situs <i>online</i> <i>Lipinski's Rule Of Five</i> .....	58
VII.4	Alur prediksi farmakokinetik menggunakan situs <i>online</i> <i>Pre ADMET</i> .....	58

VII.5	Alur prediksi toksisitas .....	59
VII.6	Tampilan situs <i>Protein Data Bank</i> .....	60
VII.7	Tampilan situs <i>PubChem</i> .....	60
VII.8	Tampilan situs <i>PreADMET</i> .....	61
VII.9	Tampilan situs <i>Lipinski's Rule of Five</i> .....	61
VII.10	Tampilan situs <i>DUD-E</i> .....	62
VII.11	Tampilan situs <i>Binding Database</i> .....	62
VII.12	Tampilan aplikasi <i>Discovery Studio Visualizer</i> <sup>®</sup> .....	63
VII.13	Tampilan aplikasi <i>AutoDock Tools</i> <sup>®</sup> .....	63
VII.14	Tampilan aplikasi <i>ChemDraw Professional 15.0</i> <sup>®</sup> .....	64
VII.15	Tampilan aplikasi <i>Notepad</i> <sup>®</sup> .....	64
VII.16	Tampilan aplikasi <i>LiganScout</i> <sup>®</sup> .....	65
VII.17	Tampilan aplikasi <i>Toxtree</i> <sup>®</sup> .....	65
VII.18	Struktur 3D makromolekul reseptor 3LN0 .....	83
VII.19	Struktur 3D makromolekul ligan 3LN0.....	83
VII.20	Model 1 farmakofor pada reseptor COX-2.....	88
VII.21	Visualisasi 2D dan 3D farmakofor ligan pembanding Etorocoxib terhadap reseptor COX-2 .....	88
VII.22	Visualisasi 2D dan 3D farmakofor senyawa Fustin terhadap reseptor COX-2 .....	89
VII.23	Visualisasi 2D dan 3D farmakofor senyawa Luteolin terhadap reseptor COX-2 .....	89
VII.24	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Acacetin terhadap reseptor	

	COX-2 ID PDB 3LN0 .....	102
VII.25	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Agathisflavone terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	102
VII.26	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Amentoflavone terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	103
VII.27	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Apigenidin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	103
VII.28	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Apigenin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	104
VII.29	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Aromadendrin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	104
VII.30	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Aureusidin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	105
VII.31	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Baicalein terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	105
VII.32	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Baptigenin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	106
VII.33	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Biochanin A terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	106
VII.34	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Butein terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	107
VII.35	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Catechin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	107

VII.36	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Chrysin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	108
VII.37	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Chrysoeriol terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	108
VII.38	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Cupressuflavone terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	109
VII.39	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Cyanidin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	109
VII.40	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Daidzein terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	110
VII.41	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Diosmetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	110
VII.42	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Epigallocatechin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	111
VII.43	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Eriodictyol terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	111
VII.44	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Fisetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	112
VII.45	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Formononetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	112
VII.46	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Fustin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	113
VII.47	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Galangin terhadap reseptor	

	COX-2 ID PDB 3LN0 .....	113
VII.48	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Genistein terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	114
VII.49	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Ginkgetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	114
VII.50	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Gossypetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	115
VII.51	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Herbacetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	115
VII.52	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Hesperetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	116
VII.53	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Hinokiflavone terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	116
VII.54	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Hispidulin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	117
VII.55	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Homoeriodictyol terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	117
VII.56	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Isoliquiritigenin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	118
VII.57	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Isoquercetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	118
VII.58	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Isorhamnetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	119

VII.59	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Kaempferide terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	119
VII.60	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Kaempferol terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	120
VII.61	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Khalkonarigenin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	120
VII.62	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Leptosidin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	121
VII.63	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Liquiritigenin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	121
VII.64	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Luteolin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	122
VII.65	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Luteolinidin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	122
VII.66	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Maritimetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	123
VII.67	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Morin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	123
VII.68	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Myricetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	124
VII.69	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Narigenin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	124
VII.70	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Naringin terhadap reseptor	

	COX-2 ID PDB 3LN0 .....	125
VII.71	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Ochnaflavone terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	125
VII.72	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Okanin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	126
VII.73	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Orobol terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	126
VII.74	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Pachypodol terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	127
VII.75	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Parietin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	127
VII.76	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Pelargonidin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	128
VII.77	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Peonidin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	128
VII.78	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Phloretin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	129
VII.79	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Phlorizin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	129
VII.80	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Pinobanksin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	130
VII.81	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Pinocembrin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	130

VII.82	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Quercetagenin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	131
VII.83	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Quercetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	131
VII.84	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Rhamnazin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	132
VII.85	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Rhamnetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	132
VII.86	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Rhoifolin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	133
VII.87	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Robinetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	133
VII.88	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Robustaflavone terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	134
VII.89	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Rutin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	134
VII.90	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Sakuranetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	135
VII.91	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Sciadopitysin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	135
VII.92	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Scutellarein terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0.....	136
VII.93	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Sulfuretin terhadap reseptor	

	COX-2 ID PDB 3LN0 .....	136
VII.94	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Tangeretin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	137
VII.95	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Taxifolin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	137
VII.96	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Tectorigenin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	138
VII.97	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Tricetin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	138
VII.98	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Tricin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	139
VII.99	Visualisasi 2D dan 3D senyawa Wogonin terhadap reseptor COX-2 ID PDB 3LN0 .....	139

