UNIVERSITAS GADJAH MADA
PREDIKSI MEKANISME ANTI-INFLAMASI JAHE MERAH (Zingiber officinale Roscoe var. rubrum) SEBAGAI TERAPI DISMENORE PRIMER: STUDI NETWORK PHARMACOLOGY, MOLECULAR DOCKING, DAN MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION
Afiyah Abdul Muluk, apt. Navista Sri Octa Ujiantari., M.Sc., Ph.D; Prof. apt. Agung Endro Nugroho M.Si., Ph.D
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

INTISARI

Dismenore primer merupakan rasa sakit yang dialami remaja perempuan dan wanita dewasa pada saat menstruasi. Pengobatan konvensional pada dismenore primer seperti OAINS dapat menimbulkan gangguan saluran cerna, untuk menghindari hal tersebut dapat digunakan terapi suportif menggunakan bahan alam, seperti jahe merah (*Zingiber officinale Roscoe var. rubrum*). Tujuan dari penelitian ini adalah identifikasi senyawa potensial yang terkandung pada Jahe Merah yang mampu menurunkan dismenore primer, mengetahui interkoneksi antara protein target melalui *network pharmacology,* mengetahui interaksi dan mekanisme kerja antara senyawa dengan protein target melalui *molecular docking* dan *molecular dynamics.*

Penelitian ini menggunakan pendekatan *in silico* dengan melakukan skrining ADMET menggunakan SwissADME dan ADMETlab pada senyawa jahe merah. Senyawa yang memenuhi kriteria kemudian dianalisis lebih lanjut menggunakan *network pharmacology* untuk mengidentifikasi protein target potensial yang berhubungan dengan dismenore primer. Target yang diprediksi selanjutnya dievaluasi melalui *molecular docking* dan *molecular dynamics simulation* untuk mengkaji interaksi senyawa jahe merah dengan target protein. Integrasi dari berbagai pendekatan ini memberikan kerangka kerja untuk memprediksi mekanisme kerja potensial jahe merah dalam terapi dismenore primer.

Hasil dari skrining ADMET terdapat 20 senyawa yang berpotensi sebagai terapi dismenore primer, dan ditemukan 3 protein target yang terkait dengan patogenesis dismenore primer (TNF, PTGS2, dan ESR1) dari *network pharmacology*. Hasil *molecular docking* menunjukan bahwa 20 senyawa tersebut berinteraksi dengan ketiga target protein dan ditemukan bahwa asam 6-gingesulfonat (6GSA) memiliki skor *docking* yang tinggi pada semua protein dibandingkan dengan senyawa pembanding. Nilai skor *docking* berkisar dari -9,7395 kcal/mol hingga -16,5603 kcal/mol. Hasil RMSD pada *molecular dynamics simulation* menunjukkan konformasi kompleks 6GSA dengan target protein stabil sekitar 3 Å. Selain itu, kestabilan konformasi ini didukung oleh data hasil RMSF, ROG dan SASA. Mekanisme aksi yang digunakan adalah TNF dan Esterogen *signaling pathway.* Dari penelitian ini dapat disimpulkan bahwa terdapat senyawa selain vanilloid (gingerol, shogaol) yaitu 6GSA yang berpotensi sebagai terapi dismenore primer.

Kata kunci : Jahe merah, dismenore primer, bioinformatika, *network pharmacology*, *molecular docking*, *molecular dynamics*.

UNIVERSITAS GADJAH MADA
PREDIKSI MEKANISME ANTI-INFLAMASI JAHE MERAH (Zingiber officinale Roscoe var. rubrum) SEBAGAI TERAPI DISMENORE PRIMER: STUDI NETWORK PHARMACOLOGY, MOLECULAR DOCKING, DAN MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION
Afiyah Abdul Muluk, apt. Navista Sri Octa Ujiantari., M.Sc., Ph.D; Prof. apt. Agung Endro Nugroho M.Si., Ph.D
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

ABSTRACT

Primary dysmenorrhea is pain experienced by adolescent girls and adult women during menstruation. Conventional treatment for primary dysmenorrhea such as NSAIDs can cause digestive tract disorders, to avoid this supportive therapy can be used using natural ingredients, such as red ginger (*Zingiber officinale Roscoe var. rubrum*). The aim of this study is to identify potential compounds contained in red Ginger that can reduce primary dysmenorrhea, to determine the interconnection between target proteins through network pharmacology, to determine the interaction and mechanism of action between compounds and target proteins through molecular docking and *molecular dynamic*s.

This study used an in silico approach by conducting ADMET screening using SwissADME and ADMETlab on red ginger compounds. Compounds that met the criteria were then further analyzed using network pharmacology to identify potential target proteins associated with primary dysmenorrhea. The predicted targets were then evaluated through molecular docking and *molecular dynamic*s simulations to examine the interactions of red ginger compounds with their target proteins. The integration of these various approaches provides a framework for predicting the potential mechanism of action of red ginger in therapy primary dysmenorrhea.

The results of ADMET screening showed 20 compounds that have the potential to therapy primary dysmenorrhea, and 3 target proteins were found that are related to the pathogenesis of primary dysmenorrhea (TNF, PTGS2, and ESR1) from network pharmacology. The docking results indicate that the 20 compounds interact with three proteins. It was found that 6-gingesulfonic acid (6GSA) had a high docking score in all proteins compared to reference compounds. The docking score values are ranging from -9.7395 kcal/mol to -16.5603 kcal/mol. The RMSD results in *molecular dynamics* simulations show that the conformation of the 6GSA complex with the target protein is stable at around 3 Å. Furthermore, this conformational stability is supported by RMSF, ROG, and SASA results. The mechanism of action used is TNF and Estrogen signaling pathway. From this study, it can be concluded that there are compounds other than vanilloid (gingerol, shogaol), namely 6GSA, which have the potential to be a therapy for primary dysmenorrhea.

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
PREDIKSI MEKANISME ANTI-INFLAMASI JAHE MERAH (Zingiber officinale Roscoe var. rubrum) SEBAGAI TERAPI DISMENORE PRIMER: STUDI NETWORK PHARMACOLOGY, MOLECULAR DOCKING, DAN MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION
Afiyah Abdul Muluk, apt. Navista Sri Octa Ujiantari., M.Sc., Ph.D; Prof. apt. Agung Endro Nugroho M.Si., Ph.D
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

Keywords: red ginger, primary dysmenorrhea, bioinformatics, network pharmacology, molecular docking, molecular dynamics.