

**Studi *In Silico* Senyawa Aktif Kitosan Sisik Ikan Haruan (*Channa Striata*) Terhadap *Interleukin-1* Receptor**

Skripsi

Diajukan guna memenuhi sebagian syarat memperoleh  
derajat Sarjana Kedokteran Gigi  
Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Lambung Mangkurat

Diajukan Oleh  
I Made Bintang Andreas  
201111210028



**UNIVERSITAS LAMBUNG MANGKURAT  
FAKULTAS KEDOKTERAN GIGI  
PROGRAM STUDI KEDOKTERAN GIGI  
BANJARMASIN**

**Februari, 2024**

## HALAMAN PERSETUJUAN UJIAN SKRIPSI

Skripsi oleh I Made Bintang Andreas ini  
Telah diperiksa dan disetujui untuk diseminarkan

Banjarmasin, Februari 2024  
Pembimbing Utama



(drg. Deby Kania Tri Putri, M.Kes)  
NIP.197912182009122001

Banjarmasin, Februari 2024  
Pembimbing Pendamping



(drg. I Wawan Arya Krishnawan Firdaus, M.Kes)  
NIP.198105032010121005

## HALAMAN PENETAPAN PANITIA PENGUJI SKRIPSI

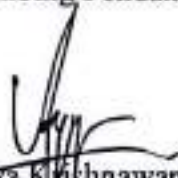
Skripsi oleh I Made Bintang Andreas  
Telah dipertahankan di depan dewan penguji  
Pada tanggal

Dewan Penguji  
Ketua (Pembimbing Utama)



drg. Deby Kania Tri Putri, M.Kes

Anggota (Pembimbing Pendamping)



drg. I Wayan Arya Krishnawan Firdaus, M.Kes

Anggota



drg. Beta Widya Oktiani, Sp.Perio

Anggota



Bambang Setiawan, S.Ked, M.Biomed

**Skripsi**

**STUDI IN SILICO SENYAWA AKTIF KITOSAN SISIK IKAN HARUAN (CHANNA STRIATA) TERHADAP INTERLEUKIN-1 RECEPTOR**

dipersiapkan dan disusun oleh

**I Made Bintang Andreas**

telah dipertahankan di depan dewan penguji  
pada tanggal **Februari 2024**

**Susunan Dewan Penguji**

**Pembimbing Utama**



**drg. Deby Kania Tri Putri, M.Kes**

**Pembimbing Pendamping**




**drg. I Wayan Arya Kristanawan Firdaus, M.Kes**

**Penguji**



**drg. Beta Widya Oktiani, Sp.Perio**

**Penguji**



**Bambang Setiawan, S.ked., M.Biomed**

Skripsi ini telah diterima sebagai salah satu persyaratan  
untuk memperoleh gelar Sarjana Kedokteran Gigi



**drg. Isnur Flatta, MAP**

**Koordinator Program Studi Kedokteran Gigi**

## HALAMAN PERNYATAAN ORIGINALITAS

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi ini merupakan hasil karya saya sendiri dan tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu perguruan tinggi. Semua sumber yang dikutip atau dirujuk dalam skripsi ini telah saya sebutkan dalam daftar pustaka.

Banjarmasin, 12 Februari 2024

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'I Made Bintang Andreas', written in a cursive style.

I Made Bintang Andreas

**HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS  
AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS**

Sebagai civitas akademik Universitas Lambung Mangkurat, saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : I Made Bintang Andreas  
NIM : 2011111210028  
Program Studi : Kedokteran Gigi  
Fakultas : Kedokteran Gigi  
Jenis karya : Skripsi

Demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Universitas Lambung Mangkurat Hak Bebas Royalti Noneksklusif (Non-exclusive Royalty Free Right) atas karya ilmiah saya yang berjudul :

***STUDI IN SILICO SENYAWA AKTIF KITOSAN SISIK IKAN HARUAN  
(CHANNA STRIATA) TERHADAP INTERLEUKIN-1 RECEPTOR***

Beserta perangkat yang ada (jika diperlukan). Dengan Hak Bebas Royalti Noneksklusif ini Universitas Lambung Mangkurat berhak menyimpan, mengalihmedia/format-kan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (database), merawat, dan mempublikasikan tugas akhir saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan sebagai pemilik Hak Cipta.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya

Dibuat di : Banjarmasin  
Pada tanggal : 12 Februari 2024  
Yang menyatakan



I Made Bintang Andreas

## RINGKASAN

### STUDI *IN SILICO* SENYAWA AKTIF KITOSAN SISIK IKAN HARUAN (*CHANNA STRIATA*) TERHADAP *INTERLEUKIN-1 RECEPTOR*

Inflamasi adalah reaksi perlindungan lokal yang disebabkan oleh Kerusakan jaringan akibat trauma fisik, zat kimia dan mikroorganisme. Peradangan mempunyai efek menghancurkan atau meminimalkan agen berbahaya maupun jaringan yang rusak. Tanda-tanda peradangan adalah pembengkakan/edema, kemerahan, kehangatan, nyeri, dan perubahan fungsional. Terapi secara kimiawi pada inflamasi bisa dilakukan dengan pemberian obat antiinflamasi *anakinra*. Penggunaan *anakinra* juga memiliki efek samping karena obat ini memiliki sifat alergen, Oleh karena itu, diperlukannya alternatif bahan yang lebih aman dan memiliki efek samping yang lebih minimal. Kitosan yang memiliki sifat antibakterial yang baik, aplikasi yang mudah, dan biodegradabilitas membuatnya menjadi kandidat yang baik untuk Agen antiinflamasi. Agen antiinflamasi dikatakan baik salah satunya jika dapat menstimulasi produksi IL1R, sehingga dapat menstimulasi efek inhibitor terhadap sitokin proinflamasi seperti IL-1 $\alpha$  dan IL-1 $\beta$ . Oleh karena itu, diperlukan analisa untuk mengetahui potensi senyawa aktif kitosan terhadap IL1R.

Penelitian ini merupakan jenis penelitian eksperimental dengan metode *in silico* untuk menguji efektivitas senyawa aktif kitosan sisik ikan haruan dalam menstimulasi IL1R dengan analisis *molecular docking* menggunakan program *Autodock Vina* yang terintegrasi di dalam aplikasi PyRx versi 0.8 dan divisualisasikan menggunakan *software BIOVIA Discovery Studio V21.1.0.20298*. Hasil penelitian didapatkan nilai binding affinity yang didapatkan dalam studi ini bervariasi antara -4,1 kkal/mol sampai -6,4 kkal/mol. Nilai binding affinity terkuat dimiliki oleh interaksi ikatan IL1R-*Anakinra* sebesar -6,4 kkal/mol, diiringi oleh ikatan IL1R-*Caryophyllene* sebesar -5,7 kkal/mol, IL1R-*Hexadecanoic acid* sebesar -4,5 kkal/mol, dan nilai binding affinity terlemah dimiliki oleh ikatan IL1R-*Dodecanoic acid* sebesar -4,1 kkal/mol. Jenis interaksi yang terjadi antara ligan dengan reseptor pada penelitian ini adalah ikatan hidrogen dan ikatan hidrofobik. Jarak ikatan pada penelitian ini juga memenuhi rentang yang ideal berkisar 2,5-3,5Å Hal ini menyatakan bahwa senyawa aktif kitosan dapat berikatan baik dengan IL1R. Senyawa yang memiliki potensi paling baik dalam berikatan dengan IL1R yaitu senyawa *Caryophyllene* (*binding affinity* tertinggi -5,7 kkal/mol).

## **SUMMARY**

### **IN SILICO STUDY OF ACTIVE COMPOUNDS OF HARUAN FISH SCALE CHITOSAN (CHANNA STRIATA) AGAINST INTERLEUKIN-1 RECEPTOR**

*Inflammation is a local protective reaction caused by tissue damage due to physical trauma, chemicals and microorganisms. Inflammation has the effect of destroying or minimizing both the harmful agent and the damaged tissue. Signs of inflammation are swelling/edema, redness, warmth, pain, and functional changes. Chemical therapy for inflammation can be done by administering the anti-inflammatory drug anakinra. The use of anakinra also has side effects because this drug has allergenic properties, therefore, an alternative material that is safer and has minimal side effects is needed. Chitosan which has good antibacterial properties, easy application, and biodegradability makes it a good candidate for anti-inflammatory agents. An anti-inflammatory agent is said to be good if it can stimulate the production of IL1R, so that it can stimulate the inhibitor effect on pro-inflammatory cytokines such as IL-1 $\alpha$  and IL-1 $\beta$ . Therefore, an analysis is needed to determine the potential of chitosan active compounds against IL1R.*

*This study is a type of experimental research with in silico method to test the effectiveness of active compounds of chitosan of haruan fish scales in stimulating IL1R with molecular docking analysis using Autodock Vina program integrated in PyRx version 0.8 application and visualized using BIOVIA Discovery Studio V21.1.0.20298 software. The results showed that the binding affinity values obtained in this study varied from -4.1 kcal/mol to -6.4 kcal/mol. The strongest binding affinity value is owned by IL1R-Anakinra bond interaction of -6.4 kcal/mol, followed by IL1R-Caryophyllene bond of -5.7 kcal/mol, IL1R-Hexadecanoic acid of -4.5 kcal/mol, and the weakest binding affinity value is owned by IL1R-Dodecanoic acid bond of -4.1 kcal/mol. The types of interactions that occur between ligands and receptors in this study are hydrogen bonds and hydrophobic bonds. The bond distance in this study also meets the ideal range of 2.5-3.5Å. This states that the active chitosan compound can bind well with IL1R. The compound that has the best potential in binding with IL1R is the Caryophyllene compound (highest binding affinity -5.7 kcal/mol).*



## ABSTRAK

### STUDI *IN SILICO* SENYAWA AKTIF KITOSAN SISIK IKAN HARUAN (*CHANNA STRIATA*) TERHADAP *INTERLEUKIN-1 RECEPTOR*

I Made Bintang Andreas, Deby Kania Tri putri, I Wayan Arya Krishnawan  
Firdaus

**Latar Belakang:** Kitosan merupakan kandidat yang baik untuk agen antiinflamasi karena memiliki sifat antibakterial yang baik, aplikasi yang mudah, dan biodegradabilitas. Senyawa aktif kitosan yang juga dipertimbangkan dapat memiliki aktivitas yang baik sebagai bahan antiinflamasi di antaranya *Dodecanoic acid*, *Hexadecanoic acid* *Caryophyllene*. **Tujuan:** Mengetahui ikatan senyawa aktif kitosan terhadap *Interleukin-1 receptor* (IL1R) untuk kandidat agen antiinflamasi. **Metode:** Penelitian ini merupakan jenis penelitian *in silico* menggunakan metode *molecular docking*. Proses docking dilakukan menggunakan program *Autodock Vina* yang terintegrasi di dalam aplikasi PyRx versi 0.8 dan divisualisasi menggunakan *software BIOVIA Discovery Studio V21.1.0.20298*. **Hasil:** Senyawa aktif kitosan dapat berikatan baik dengan IL1R. Senyawa terbaik yang didapatkan adalah *Caryophyllene* (*binding affinity* tertinggi, -5,7 kkal/mol). **Kesimpulan:** Senyawa *Caryophyllene* memiliki potensi dalam proses antiinflamasi melalui stimulasi IL1R.

**Kata Kunci:** Antiinflamasi, kitosan, sisik ikan haruan (*Channa striata*),  
senyawa aktif kitosan, *moleculardocking*, *interleukin-1 receptor*.

## **ABSTRACT**

### ***IN SILICO STUDY OF ACTIVE COMPOUNDS OF HARUAN FISH SCALE CHITOSAN (CHANNA STRIATA) AGAINST INTERLEUKIN-1 RECEPTOR***

**I Made Bintang Andreas, Deby Kania Tri putri, I Wayan Arya Krishnawan Firdaus**

**Background:** Chitosan is a good candidate for anti-inflammatory agents because it has good antibacterial properties, easy application, and biodegradability. Active compounds of chitosan that are also considered to have good activity as bone graft materials include Dodecanoic acid, Hexadecanoic acid Caryophyllene. **Purpose:** Knowing the binding of chitosan active compounds to Interleukin-1 receptor (IL1R) for anti-inflammatory agent candidates. **Methods:** This research is an *in silico* research using the molecular docking method. The docking process was carried out using the Autodock Vina program which was integrated into the PyRx version 0.8 application and visualized using the BIOVIA Discovery Studio V21.1.0.20298 software. **Results:** The active compound of chitosan can bind well with IL1R. The best compound obtained was Caryophyllene (highest binding affinity, -5.7 kcal/mol). **Conclusion:** Caryophyllene compounds have potential in the anti-inflammatory process through IL1R stimulation

**Keywords:** Anti-inflammatory, chitosan, haruan fish scales (*Channa striata*), active compound chitosan, molecular docking, interleukin-1 receptor

## KATA PENGANTAR

Puji syukur kepada Tuhan Yang Maha Esa yang telah memberikan berkat-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul **“STUDI IN SILICO SENYAWA AKTIF KITOSAN SISIK IKAN HARUAN (CHANNA STRIATA) TERHADAP INTERLEUKIN-1 RECEPTOR”**, tepat pada waktunya.

Skripsi dengan judul di atas sebagai implementasi visi dan misi Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Lambung Mangkurat menjadi Fakultas Kedokteran Gigi Terkemuka dan Berdaya Saing yang Menghasilkan Sarjana Kedokteran Gigi yang Handal dalam Keilmuan, Unggul Dalam Bidang Riset Bahan Alam Kedokteran Gigi dari Lingkungan Lahan Basah dan Menciptakan Dokter Gigi yang Profesional.

Skripsi ini disusun untuk memenuhi sebagian syarat guna memperoleh derajat sarjana kedokteran gigi di Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Lambung Mangkurat Banjarmasin. Dalam kesempatan ini penulis mengucapkan terima kasih kepada:

Dekan Fakultas Kedokteran Gigi, Dr. drg. Maharani Laillyza Apriasari, Sp.PM dan ketua Program Studi Kedokteran Gigi, drg. Isnur Hatta, MAP yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.

Kedua dosen pembimbing, drg. Deby Kania Tri Putri, M.Kes dan drg. I Wayan Arya Krishnawan Firdaus, M.Kes yang berkenan memberikan saran dan arahan dalam penyelesaian karya tulis ilmiah ini.

Kedua dosen penguji, drg. Beta Widya Oktiani, Sp.Perio dan Bapak Bambang Setiawan, S.Ked.,M.Biomed yang memberikan kritik dan saran sehingga karya tulis ilmiah ini menjadi semakin baik.

Semua dosen dan staff tata usaha Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Lambung Mangkurat yang telah mendidik, membantu, dan memberikan masukan kepada penulis selama menjalani masa pendidikan dan menyelesaikan skripsi ini.

Kedua orang tua penulis, I Nyoman Siem dan Harnariani, serta kakak dan adik penulis Ni Luh Putu Ines Suhartiningsih Putri dan Kezia Valenzia Putri, serta keluarga penulis yang tidak bisa disebutkan satu per satu yang selalu memberikan dukungan baik moril maupun materil sampai terselesaikannya skripsi ini.

Rekan penelitian, Rabiatul Adawiah dan Ashifa Qinthara Milyanur, serta rekan seperjuangan angkatan 2020, Alveolar, serta semua pihak atas semangat, sumbangan pikiran, dan bantuan yang telah diberikan.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih jauh dari kesempurnaan, akan tetapi penulis berharap penelitian ini dapat bermanfaat bagi dunia ilmu pengetahuan.

Banjarmasin, 12 Februari 2024



Penulis

## DAFTAR ISI

	Halaman
<b>HALAMAN SAMPUL .....</b>	<b>i</b>
<b>HALAMAN PERSETUJUAN UJIAN SKRIPSI .....</b>	<b>iii</b>
<b>HALAMAN PENETAPAN PANITIA PENGUJI SKRIPSI.....</b>	<b>vi</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN .....</b>	<b>v</b>
<b>HALAMAN PERNYATAAN ORIGINALITAS.....</b>	<b>vi</b>
<b>HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI</b>	
<b>TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS .....</b>	<b>vii</b>
<b>RINGKASAN .....</b>	<b>viii</b>
<b>SUMMARY .....</b>	<b>ix</b>
<b>ABSTRAK .....</b>	<b>x</b>
<b>ABSTRACT .....</b>	<b>xi</b>
<b>KATA PENGANTAR.....</b>	<b>xii</b>
<b>DAFTAR ISI.....</b>	<b>xiv</b>
<b>DAFTAR SINGKATAN.....</b>	<b>xvii</b>
<b>DAFTAR TABEL .....</b>	<b>xix</b>
<b>DAFTAR GAMBAR.....</b>	<b>xx</b>
<b>DAFTAR LAMPIRAN.....</b>	<b>xxi</b>
<b>BAB 1 PENDAHULUAN .....</b>	<b>1</b>
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah.....	4
1.3 Tujuan Penelitian .....	4
1.3.1 Tujuan Umum.....	4
1.3.2 Tujuan Khusus .....	5
1.4 Manfaat Penelitian .....	5
1.4.1 Manfaat Teoritis .....	5
1.4.2 Manfaat Klinis .....	6
1.4.3 Manfaat Masyarakat .....	6

<b>BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA.....</b>	<b>7</b>
2.1 Inflamasi .....	7
2.2 Ikan Haruan .....	9
2.2.1 Taksonomi Ikan Haruan .....	10
2.3 Sisik Ikan Haruan .....	11
2.4 Kitosan.....	11
2.5 <i>Anakinra</i> .....	14
2.6 Studi <i>In Silico</i> .....	14
2.7 <i>Molecular Docking</i> .....	15
2.8. <i>Protein Data Bank</i> .....	16
2.9 NCBI PubChem.....	17
2.10 Aplikasi PyRx.....	18
2.11 <i>BIOVIA Discovery Studio</i> .....	18
2.12 Ikatan Ion .....	19
2.13 Ikatan Hidrogen .....	20
2.14 Ikatan <i>Van der Waals</i> .....	20
2.15 Ikatan Kovalen.....	21
2.16 Kerangka Teori .....	22
2.17 Penjelasan Kerangka Teori .....	23
<b>BAB 3 KERANGKA KONSEP.....</b>	<b>24</b>
3.1 Kerangka Konsep .....	24
<b>BAB 4 METODE PENELITIAN.....</b>	<b>25</b>
4.1 Rancangan Penelitian.....	25
4.2 Variabel Penelitian.....	25
4.2.1 Variabel Bebas.....	25
4.2.2 Variabel Terikat.....	25
4.2.3 Definisi Operasional .....	26
4.3 Bahan Penelitian .....	28
4.3.1 Senyawa Kitosan Sisik Ikan Haruan ( <i>Channa striata</i> ) dan Turunannya .....	28

4.3.2 <i>Interleukin-1 receptor (IL1R)</i> .....	29
4.4 Alat Penelitian .....	29
4.4.1 Perangkat Keras .....	29
4.4.2 Perangkat Lunak .....	30
4.5 Tempat dan Waktu Penelitian.....	32
4.6 Prosedur Penelitian .....	32
4.6.1 Persiapan.....	32
4.6.2 Pengunduhan Ligan .....	32
4.6.3 Minimasi Ligan .....	33
4.6.4 Pengunduhan Reseptor .....	33
4.6.5 Preparasi Reseptor .....	34
4.6.6 Validasi Metode <i>Docking</i> .....	35
4.6.7 <i>Molecular Docking</i> .....	35
4.6.8 Visualisasi Hasil <i>Docking</i> .....	36
4.6.9 Alur Uji <i>in Silico</i> .....	37
4.7 Prosedur Pengambilan dan Pengumpulan Data.....	38
4.8 Cara Pengolahan dan Analisis Data.....	38
<b>BAB 5 HASIL PENELITIAN .....</b>	<b>39</b>
5.1 Data dan Analisa Hasil Penelitian .....	39
<b>BAB 6 PEMBAHASAN .....</b>	<b>49</b>
6.1 <i>Molecular Docking</i> IL1R dengan Ligan Uji dan Ligan Pembanding.....	49
<b>BAB 7 PENUTUP.....</b>	<b>53</b>
7.1 Kesimpulan .....	53
7.2 Saran .....	54
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	
<b>LAMPIRAN</b>	

## DAFTAR SINGKATAN

AEC	: <i>Aminoethyl Chitosan</i>
CID	: <i>Compound ID</i>
COX-2	: <i>Siklooksigenase-2</i>
DNA	: <i>Deoxyribonucleic Acid</i>
HBA	: <i>Hydrogen Bond Acceptor</i>
HBD	: <i>Hydrogen Bond Donor</i>
IL-1r	: <i>Interleukin-1 receptor</i>
IL1RA	: <i>Complex of the interleukin-1 receptor with the interleukin-1 receptor antagonist</i>
IL-1ra	: <i>Interleukin-1 receptor antagonist</i>
IL-1 $\alpha$	: <i>Interleukin-1<math>\alpha</math></i>
IL-1 $\beta$	: <i>Interleukin-1<math>\beta</math></i>
IL-6	: <i>Interleukin-6</i>
LPS	: <i>Lipopolisakarida</i>
MAMPs	: <i>Microbe-associated Molecular Patterns</i>
NAG	: <i>N-acetylglucosamine</i>
N-CM	: <i>N-Carboxymethyl Chitosan</i>
NLM	: <i>National Library of Medicine</i>
NSC	: <i>N-succinyl Chitosan</i>
PDB	: <i>Protein Data Bank</i>
PGE2	: <i>Prostaglandin E2</i>
PPB	: <i>Plasma Protein Binding</i>
PRRs	: <i>Pattern Recognition Receptors</i>
RAM	: <i>Random Access Memory</i>
RMSD	: <i>Root-mean-square deviation</i>
RNA	: <i>Ribonucleid Acid</i>
SDF	: <i>Specialized Database Functions</i>
SID	: <i>Substance ID</i>
TLR-2	: <i>Toll-Like Receptor-2</i>



TNF- $\alpha$  : *Tumor Necrosis Factor alpha*

VdW : *Van der Waals*

## DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
2.1 Turunan kitin dan kitosan .....	12
4.1 Definisi Operasional Penelitian .....	20
4.2 Senyawa Kitosan, Turunan Kitosan, dan Ligan Pembanding .....	28
4.3 Keterangan Identitas <i>complex of the interleukin-1 receptor with the interleukin-1 receptor antagonist (IL1RA)</i> .....	30
4.4 Tabel pengumpulan data uji in silico senyawa kitosan dan turunannya terhadap <i>interleukin-1 receptor</i> .....	39
5.1 Hasil Docking Interleukin-1 receptor dengan senyawa aktif kitosan sisik ikan haruan dan Anakinra .....	41

## DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
2.1 Ikan Haruan .....	11
2.2 Kerangka Teori Studi In Silico Senyawa Kitosan dan Turunannya terhadap <i>Interleukin-1</i> .....	22
3.1 Kerangka Konsep Penelitian Studi In Silico Senyawa Kitosan Sisik Ikan. Haruan ( <i>Channa striata</i> ) dan Turunannya Terhadap Interleukin .....	24
4.1 Struktur 3D <i>complex of the interleukin-1 receptor with the interleukin-1 receptor antagonist (IL1RA)</i> .....	29
4.2 Website PubChem.....	31
4.3 Website Protein Data Bank .....	31
4.4 Aplikasi PyRx .....	31
4.5 Aplikasi <i>Biovia Discovery Studio</i> .....	32
4.6 Skema Alur Penelitian Studi In Silico Senyawa aktif kitosan terhadap <i>Interleukin 1 receptor</i> .....	38
5.1 Hasil Preparasi IL1R.....	40
5.2 A Struktur 3D Hasil Docking IL-1R dengan Dodecanoic acid .....	43
5.2 B Struktur 2D Hasil Docking IL-1R dengan Dodecanoic acid .....	43
5.3 A Struktur 3D Hasil Docking IL-1R dengan Hexadecanoic acid.....	44
5.3 B Struktur 2D Hasil Docking IL-1R dengan Hexadecanoic acid .....	44
5.4 A Struktur 3D Hasil Docking IL-1R dengan Caryophyllene.....	45
5.4 B Struktur 2D Hasil Docking IL-1R dengan Caryophyllene.....	45
5.5 A Struktur 3D Hasil Docking IL-1R dengan Anakinra .....	46
5.5 B Struktur 2D Hasil Docking IL-1R dengan Anakinra .....	46

## **DAFTAR LAMPIRAN**

### **Lampiran**

1. Jadwal Kegiatan
2. Rincian Biaya
3. Hasil Molecular Docking pada Aplikasi PyRx
4. Dokumentasi Proses Visualisasi Hasil Docking
5. Dokumentasi Proses Docking