

**INTERAKSI SENYAWA AKTIF KITOSAN SISIK IKAN  
HARUAN (*Channa striata*) TERHADAP *TUMOR NECROSIS  
FACTOR ALPHA* SEBAGAI ANTIINFLAMASI  
(kajian interaksi secara studi *in silico*)**

Skripsi

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

Diajukan Oleh  
Rabiatul Adawiah  
2011111220021



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

**Februari, 2024**

## HALAMAN PERSETUJUAN UJIAN SKRIPSI

Skripsi oleh Rabiatul Adawiah ini  
Telah diperiksa dan disetujui untuk diseminarkan

Banjarmasin, 2 Februari 2024  
Pembimbing Utama



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

Banjarmasin, 5 Februari 2024  
Pembimbing Pendamping



Dr. drg. Widado, M.M., M.Kes  
NIP. 197005012000121003

## HALAMAN PENETAPAN PANITIA PENGUJI SKRIPSI

Skripsi oleh Rabiatul Adawiah  
Telah dipertahankan di depan dewan penguji  
Pada tanggal 20 Februari 2024

Dewan Penguji  
Ketua (Pembimbing Utama)



drg. Deby Kania Tri Putri, M.Kes

Anggota (Pembimbing Pendamping)




Dr. drg. Widodo, M.M., M.Kes

Anggota



drg. Amy Nindia Carabelly, M.Si

Anggota



Dr. drg. Debby Saputera, Sp.Pros

**Skripsi**

**INTERAKSI SENYAWA AKTIF KITOSAN SISIK IKAN HARUAN  
(*Channa striata*) TERHADAP *TUMOR NECROSIS FACTOR ALPHA*  
SEBAGAI ANTIINFLAMASI  
(kajian secara studi *in silico*)**

dipersiapkan dan disusun oleh

**Rabiatul Adawiah**

telah dipertahankan di depan dewan penguji  
pada tanggal **20 Februari 2024**

**Susunan Dewan Penguji**

Pembimbing Utama



drg. Deby Kania Tri Putri, M.Kes

Pembimbing Pendamping



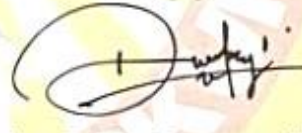
Dr. drg. Widodo, M.M., M.Kes

Penguji



drg. Amy Nindia Carabelly, M.Si

Penguji



Dr. drg. Debby Saputera, Sp.Pros

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



**drg. Isnur Hatta, 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, 19 Februari 2024



Rabiatul Adawiah

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

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

Nama : Rabiatul Adawiah  
NIM : 2011111220021  
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 :

**“INTERAKSI SENYAWA AKTIF KITOSAN SISIK IKAN HARUAN (*Channa striata*) TERHADAP *TUMOR NECROSIS FACTOR ALPHA* SEBAGAI ANTIINFLAMASI (kajian secara studi *in silico*)”**

Beserta perangkat yang ada (jika diperlukan). Dengan Hak Bebas Royalti Noneksklusif ini Universitas Lambung Mangkurat berhak menyimpan, mengalih media/format-kan, mengelola dalam bentuk pangkatan 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 : 19 Februari 2024  
Yang menyatakan



Rabiatul Adawiah

## RINGKASAN

### **INTERAKSI SENYAWA AKTIF KITOSAN SISIK IKAN HARUAN (*Channa striata*) TERHADAP TUMOR NECROSIS FACTOR ALPHA SEBAGAI ANTIINFLAMASI (kajian secara studi *in silico*)**

Inflamasi pada rongga mulut sering ditunjukkan pada beberapa bagian penting seperti jaringan gingiva, periodontal, maupun pulpa yang disebabkan karena rangsangan berbahaya, seperti patogen, sel-sel yang rusak, senyawa beracun, atau iradiasi. Interaksi tersebut akan mengaktifkan sel makrofag untuk memicu ekspresi dari mediator proinflamasi seperti *Tumor Necrosis Factor Alpha* (TNF- $\alpha$ ) yang akan meningkatkan aktivitas ekstravasasi neutrofil ke jaringan yang mengalami peradangan untuk memfagositosis bakteri dan produknya sehingga terjadi inflamasi. TNF- $\alpha$  merupakan sitokin utama pada respon inflamasi dan sitokin tersebut juga akan diproduksi dalam jumlah yang besar terutama pada infeksi yang berat dan jika diekspresikan secara berlebihan akan memiliki efek destruktif pada jaringan. Penggunaan obat anti inflamasi golongan TNF- $\alpha$  inhibitor diperlukan pada kondisi tertentu untuk mengontrol respon inflamasi yang terjadi dan mencegah terjadinya perluasan kerusakan jaringan, namun jika digunakan secara tidak rasional dan dalam jangka panjang obat ini dilaporkan memiliki efek samping lokal maupun sistemik. Salah satu bahan biomaterial yang banyak dikaji sebagai terapi antiinflamasi adalah kitosan. Kitosan dapat berasal dari sumber daya alam perairan Indonesia salah satunya yaitu sisik Ikan haruan (*Channa striata*). Berkembangnya riset di bidang farmakologi dan biomedis membuat perlunya pembatasan penggunaan hewan uji coba, selain karena perlu waktu dan biaya yang besar serta untuk memperhatikan kode etik dalam penggunaan hewan uji, sehingga metode *in silico* mulai banyak digunakan.

Penelitian ini menggunakan metode *in silico* untuk mengetahui apakah senyawa aktif kitosan sisik Ikan haruan (*Channa striata*) memiliki interaksi yang baik dengan TNF- $\alpha$  dan berpotensi sebagai antiinflamasi. Jenis penelitian ini merupakan penelitian pre-eksperimental secara *in silico* untuk melakukan perhitungan komputasi kinerja tinggi guna mengkaji suatu *database* dari senyawa-senyawa aktif terhadap protein target. Penelitian ini digunakan cara analisis *molecular docking*. Parameter yang digunakan dalam *molecular docking* ini adalah *binding affinity*, jarak ikatan, dan jenis interaksi residu asam amino. Hasil penelitian didapatkan bahwa senyawa aktif kitosan sisik ikan haruan (*Channa striata*) memiliki interaksi yang baik dengan TNF- $\alpha$  dan memiliki potensi sebagai bahan kandidat obat antiinflamasi.

## SUMMARY

### **INTERACTION OF ACTIVE COMPOUNDS OF CHITOSAN FROM HARUAN FISH (*Channa striata*) SCALES TO TUMOR NECROSIS FACTOR ALPHA AS ANTIINFLAMMATION (in silico study)**

*Inflammation in the oral cavity is often shown in several important parts such as gingival, periodontal, and pulp tissues caused by harmful stimuli, such as pathogens, damaged cells, toxic compounds, or irradiation. These interactions activate macrophage cells to trigger the expression of proinflammatory mediators such as Tumor Necrosis Factor Alpha (TNF- $\alpha$ ) which increases the extravasation activity of neutrophils into the inflamed tissue to phagocytose bacteria and their products, resulting in inflammation. TNF- $\alpha$  is the main cytokine in the inflammatory response and the cytokine will also be produced in large quantities especially in severe infections and if overexpressed will have a destructive effect on the tissue. The use of anti-inflammatory drugs of the TNF- $\alpha$  inhibitor class is needed in certain conditions to control the inflammatory response that occurs and prevent the expansion of tissue damage, but if used irrationally and in the long term these drugs are reported to have local and systemic side effects. One biomaterial that is widely studied as an anti-inflammatory therapy is chitosan. Chitosan can be derived from the natural resources of Indonesian waters, one of which is haruan fish scales (*Channa striata*). The development of research in the field of pharmacology and biomedicine has made it necessary to limit the use of animal testing, apart from the need for time and large costs and to pay attention to the code of ethics in the use of animal testing, so that in silico methods have begun to be widely used.*

*This study uses the in silico method to determine whether the active compound chitosan of haruan fish scales (*Channa striata*) has a good interaction with TNF- $\alpha$  and has potential as an anti-inflammatory. This type of research is pre-experimental research in silico to perform high-performance computational calculations to examine a database of active compounds against target proteins. This research used molecular docking analysis. The parameters used in molecular docking are binding affinity, bond distance, and type of amino acid residue interaction. The results showed that the active compound chitosan of haruan fish scales (*Channa striata*) has a good interaction with TNF- $\alpha$  and has potential as a candidate material for anti-inflammatory drugs.*



## ABSTRAK

### INTERAKSI SENYAWA AKTIF KITOSAN SISIK IKAN HARUAN (*Channa striata*) TERHADAP *TUMOR NECROSIS FACTOR ALPHA* SEBAGAI ANTIINFLAMASI (kajian secara studi *in silico*)

Rabiatul Adawiah, Deby Kania Tri Putri, Widodo, Amy Nindia Carabelly,  
Debby Saputera

**Latar Belakang :** Senyawa aktif kitosan sisik Ikan haruan (*Channa striata*) memiliki potensi sebagai antiinflamasi. Berdasarkan uji GC-MS ditemukan senyawa aktif yang terkandung pada kitosan tersebut terdiri dari *Caryophyllene*, *Dodecanoic acid*, dan *Hexadecanoic acid*. **Tujuan :** Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui apakah senyawa aktif kitosan sisik Ikan haruan (*Channa striata*) memiliki ikatan yang baik dengan *Tumor Necrosis Factor Alpha* sebagai kandidat obat antiinflamasi. **Metode :** Jenis penelitian ini adalah pre-eksperimental secara *in silico* menggunakan metode *molecular docking*. Proses *docking* dilakukan menggunakan Autodock Vina yang sudah terintegrasi pada aplikasi PyRx. **Hasil :** Uji *drug-likeness* menunjukkan bahwa senyawa aktif kitosan sisik ikan haruan yang digunakan memenuhi aturan Lipinski. Senyawa aktif kitosan sisik Ikan haruan (*Channa striata*) yang terbaik adalah *caryophyllene* (*binding affinity* terendah, -7,4 kkal/mol) dan *dodecanoic acid* (memiliki ikatan hidrogen, residu asam amino yang sama paling banyak dengan ligan perbandingan, dan jarak ikatan residu asam amino terpendek). **Kesimpulan :** Senyawa aktif kitosan sisik Ikan haruan (*Channa striata*) memiliki ikatan yang baik dengan *Tumor Necrosis Factor Alpha*, yang artinya memiliki potensi sebagai antiinflamasi melalui penghambatan TNF- $\alpha$ .

**Kata Kunci :** Antiinflamasi, *in silico*, *molecular docking*, kitosan, sisik ikan haruan (*Channa striata*), TNF- $\alpha$ .

## **ABSTRACT**

### **INTERACTION OF ACTIVE COMPOUNDS OF CHITOSAN FROM HARUAN FISH (*Channa striata*) SCALES TO TUMOR NECROSIS FACTOR ALPHA AS ANTIINFLAMMATION (*in silico* Study)**

**Rabiatul Adawiah, Deby Kania Tri Putri, Widodo, Amy Nindia Carabelly, Debby Saputera**

**Background:** The active compound chitosan of haruan fish scales (*Channa striata*) has potential as an anti-inflammatory. Based on the GC-MS test, it was found that the active compounds contained in the chitosan consisted of Caryophyllene, Dodecanoic acid, and Hexadecanoic acid. **Purpose:** This study aims to determine whether the active compound chitosan of haruan fish scales (*Channa striata*) has a good bond with Tumor Necrosis Factor Alpha as an anti-inflammatory drug candidate. **Methods:** This type of research is pre-experimental *in silico* using molecular docking method. The docking process was carried out using Autodock Vina which has been integrated in the PyRx application. **Results:** Drug-likeness test shows that the active compounds of chitosan of haruan fish scales used fulfill Lipinski's rule. The best active compounds of haruan fish scale chitosan (*Channa striata*) are caryophyllene (lowest binding affinity, -7.4 kcal/mol) and dodecanoic acid (has hydrogen bonds, the most amino acid residues in common with the comparator ligand, and the shortest amino acid residue bond distance). **Conclusion:** The active compound chitosan of haruan fish scales (*Channa striata*) has a good bond with Tumor Necrosis Factor Alpha, which means it has potential as an anti-inflammatory through TNF- $\alpha$  inhibition.

**Keywords:** Anti-inflammatory, *in silico*, molecular docking, chitosan, haruan fish scales (*Channa striata*), TNF- $\alpha$ .

## KATA PENGANTAR

Puji syukur ke hadirat Allah SWT yang telah memberikan rahmat-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul **“INTERAKSI SENYAWA AKTIF KITOSAN SISIK IKAN HARUAN (*Channa striata*) TERHADAP TUMOR NECROSIS FACTOR ALPHA SEBAGAI ANTIINFLAMASI (kajian secara studi *in silico*)”**, tepat pada waktunya.

Skripsi ini disusun untuk memenuhi sebagian syarat guna memperoleh derajat Sarjana Kedokteran Gigi di Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Lambung Mangkurat. Dalam kesempatan ini penulis mengucapkan terimakasih kepada:

Dekan Fakultas Kedokteran Gigi, Prof. Dr. drg. Maharani Laillyza Apriasari, Sp. PM yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.

Wakil Dekan Fakultas Kedokteran Gigi, drg. Irham Taufiqurrahman, M.Si., Med., Sp.BMMF(K) FICS yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.

Koordinator 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 Dr. drg. Widodo, M.M., M.Kes yang berkenan memberikan saran serta arahan dalam penyelesaian skripsi ini.

Kedua dosen penguji, drg. Amy Nindia Carabelly, M.Si dan Dr. drg. Debby Saputera, Sp.Pros yang telah memberikan kritik dan saran sehingga skripsi ini menjadi semakin baik.

Seluruh staff pengajar di Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Lambung Mangkurat yang telah mendidik, membantu dan memberikan masukan kepada penulis selama menjalani masa pendidikan dan menyelesaikan skripsi ini.

Kedua orangtua tersayang, bapak H. Muhammad Sahli, S.Sos., M.AP dan ibu Hj. Khairiah, serta kedua kakak yaitu Ns. Much. Faisal Hafiz dan Muhammad Aulia Rahman, S.E yang selalu memberikan perhatian dan dukungan penuh baik moril, materil, motivasi, harapan, dan do'a sampai selesainya skripsi ini.

Rekan penelitian bidang Biologi Oral, sahabat saya Ashifa Qintara Milyanur, Krisna Erlangga Putra Ramadhani, dan Muhammad Khairul Ikhsan serta teman seperjuangan di Fakultas Kedokteran Gigi Universitas Lambung Mangkurat angkatan 2020 yang selalu kebersamai dan memberikan masukan, tidak lupa juga kepada semua pihak yang telah membantu proses penelitian ini yang tidak dapat penulis sebutkan satu persatu atas sumbangan pikiran dan bantuan yang telah diberikan.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih jauh dari kesempurnaan, akan tetapi penulis berharap penelitian ini bermanfaat bagi dunia ilmu pengetahuan terutama di bidang Kedokteran Gigi.

Banjarmasin, 19 Februari 2024



Penulis

## DAFTAR ISI

	Halaman
<b>HALAMAN SAMPUL</b> .....	<b>i</b>
<b>HALAMAN PERSETUJUAN UJIAN SKRIPSI</b> .....	<b>ii</b>
<b>HALAMAN PENETAPAN PANITIA PENGUJI SKRIPSI</b> .....	<b>iii</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b> .....	<b>iv</b>
<b>HALAMAN PERNYATAAN ORIGINALITAS</b> .....	<b>v</b>
<b>HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS</b> .....	<b>vi</b>
<b>RINGKASAN</b> .....	<b>vii</b>
<b>SUMMARY</b> .....	<b>viii</b>
<b>ABSTRAK</b> .....	<b>ix</b>
<b>ABSTRACT</b> .....	<b>x</b>
<b>KATA PENGANTAR</b> .....	<b>xi</b>
<b>DAFTAR ISI</b> .....	<b>xiii</b>
<b>DAFTAR SINGKATAN</b> .....	<b>xvii</b>
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	<b>xviii</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	<b>xix</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 .....	4
1.4 Manfaat Penelitian .....	5
1.4.1 Manfaat Teoritis .....	5
1.4.2 Manfaat Praktis .....	5
<b>BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA</b> .....	<b>6</b>
2.1 Ikan Haruan ( <i>Channa striata</i> ).....	6
2.1.1 Sisik Ikan Haruan ( <i>Channa striata</i> ).....	7
2.2 Kitosan .....	7

2.3 Senyawa Aktif Kitosan Sisik Ikan Haruan ( <i>Channa striata</i> ) .....	9
2.3.1 <i>Caryophyllene</i> .....	9
2.3.2 <i>Dodecanoic acid</i> .....	10
2.3.3 <i>Hexadecanoic Acid</i> .....	11
2.4 <i>Tumor Necrosis Factor Alpha</i> (TNF- $\alpha$ ).....	11
2.5 SPD304 (TNF- $\alpha$ <i>Inhibitor</i> ) .....	15
2.6 Studi <i>in silico</i> .....	16
2.6.1 <i>Molecular Docking</i> .....	16
2.7 Interaksi Ikatan .....	19
2.7.1 Ikatan Hidrogen .....	19
2.7.2 Ikatan Ion .....	20
2.7.3 <i>Van Der Waals</i> .....	20
2.7.4 Ikatan Kovalen .....	20
2.8 Perangkat Lunak .....	21
2.8.1 <i>Protein Data Bank</i> (PDB).....	21
2.8.2 PubChem.....	21
2.8.3 <i>BIOVIA Discovery Studio</i> .....	22
2.8.4 PyRx.....	22
2.9 Kerangka Teori .....	23
<b>BAB 3 KERANGKA KONSEP DAN HIPOTESA .....</b>	<b>26</b>
3.1 Kerangka Konsep.....	26
3.2 Hipotesis .....	27
<b>BAB 4 METODE PENELITIAN .....</b>	<b>28</b>
4.1 Rancangan Penelitian.....	28
4.2 Variabel Penelitian.....	28
4.2.1 Variabel Bebas .....	28
4.2.2 Variabel Terikat .....	28
4.2.3 Definisi Operasional .....	29
4.3 Bahan Penelitian .....	31
4.3.1 Ligan dan Ligan Pembanding .....	31
4.3.2 Reseptor .....	32
4.4 Alat Penelitian .....	33

4.4.1 Perangkat Keras .....	33
4.4.2 Perangkat Lunak .....	33
4.5 Tempat dan Waktu Penelitian.....	34
4.6 Prosedur Penelitian .....	34
4.6.1 Persiapan .....	34
4.6.2 Pengunduhan Ligan .....	35
4.6.3 Minimasi Ligan .....	35
4.6.4 Pengunduhan Reseptor.....	36
4.6.5 Preparasi Reseptor .....	36
4.6.6 Uji <i>Drug-likeness</i> .....	37
4.6.7 Validasi Metode <i>Docking</i> .....	37
4.6.8 <i>Molecular docking</i> .....	38
4.6.9 Visualisasi Hasil <i>Docking</i> .....	39
4.6.10 Alur Uji <i>in silico</i> .....	40
4.7 Prosedur Pengambilan dan Pengumpulan Data.....	41
4.8 Cara Pengolahan dan Analisis Data.....	41
<b>BAB 5 HASIL PENELITIAN .....</b>	<b>42</b>
5.1 Data Penelitian.....	42
5.1.1 Uji <i>Drug-Likeness</i> .....	42
5.1.2 <i>Molecular Docking</i> .....	45
5.1.3 Validasi <i>Docking</i> .....	47
5.2 Analisis Hasil Penelitian.....	48
<b>BAB 6 PEMBAHASAN .....</b>	<b>50</b>
6.1 <i>Molecular docking</i> Ligan Uji Senyawa Aktif Kitosan Sisik Ikan Haruan ( <i>Channa striata</i> ) dan Ligan Pembanding SPD304 Terhadap TNF- $\alpha$ .....	50
6.1.1 <i>Binding Affinity</i> .....	50
6.1.2 Jenis Interaksi dan Residu Asam Amino .....	52
6.1.3 Jarak Ikatan Residu Asam Amino.....	53
6.2 Interaksi Senyawa Aktif Kitosan Sisik Ikan Haruan ( <i>Channa striata</i> ) terhadap TNF- $\alpha$ .....	54
6.3 Keterbatasan Penelitian .....	55
<b>BAB 7 PENUTUP.....</b>	<b>56</b>
7.1 Kesimpulan .....	56

7.2 Saran ..... 57

**DAFTAR PUSTAKA**

**LAMPIRAN**



## DAFTAR SINGKATAN

Cell NK	: <i>Cell Natural Killer</i>
COX	: Cyclooxygenase
GC-MS	: <i>Gas Chromatography-Mass Spectrometry</i>
HCl	: Hidrogen Klorida
IFN	: Interferon
IL	: Interleukin
IRF	: <i>Interferon Regulatory Factor</i>
MAPK	: <i>Mitogen-Activated Protein Kinase</i>
miRNA	: <i>Micro-RNA</i>
NF- $\kappa$ B	: <i>Nuclear Factor Kappa B</i>
NMR	: <i>Nuclear Magnetic Resonance</i>
NO	: Nitrit Oksida
PAMP	: <i>Pathogen-Associated Molecular Pattern</i>
PGE <sub>2</sub>	: <i>Prostaglandin E2</i>
PMN	: Polimorfonuklear
PRR	: <i>Pattern Recognition Receptor</i>
RAM	: <i>Random-Access Memory</i>
siRNA	: <i>Small-interfering RNA</i>
TNF- $\alpha$	: <i>Tumor Necrosis Factor-<math>\alpha</math></i>
US FDA	: <i>United State Food and Drug Administration</i>
GLY	: Glisin
TYR	: Tirosin
CYS	: Sisteine
LYS	: Lisin
HIS	: Histidin
LEU	: Leusin

## DAFTAR TABEL

<b>Tabel</b>	<b>Halaman</b>
2.1 Taksonomi ikan haruan ( <i>Channa striata</i> ) .....	6
2.2 Turunan kitosan.....	8
2.3 Hasil Uji GC-MS Kitosan Sisik Ikan Haruan ( <i>Channa striata</i> ) .....	9
2.4 Keterangan identitas 3D <i>Tumor Necrosis Factor Alpha</i> (TNF- $\alpha$ ).....	16
4.1 Definisi operasional penelitian.....	29
4.2 Senyawa ligan dan ligan pembanding.....	31
4.3 Keterangan identitas 3D <i>Tumor Necrosis Factor Alpha</i> (TNF- $\alpha$ ).....	32
4.4 Pengumpulan data uji <i>in silico</i> senyawa aktif kitosan sisik ikan Haruan ( <i>Channa striata</i> ) terhadap <i>Tumor Necrosis Factor Alpha</i> (TNF- $\alpha$ ) .....	41
5.1 Karakteristik molekul senyawa aktif kitosan sisik ikan Haruan ( <i>Channa striata</i> ) yang didapatkan dari hasil GCMS.....	43
5.2 Hasil uji <i>drug-likeness</i> (Aturan Lipinski).....	44
5.3 Pengumpulan data uji <i>in silico</i> senyawa aktif kitosan sisik ikan Haruan ( <i>Channa striata</i> ) terhadap <i>Tumor Necrosis Factor Alpha</i> (TNF- $\alpha$ ) .....	48

## DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
2.1 Ikan haruan ( <i>Channa striata</i> ).....	7
2.2 Mekanisme antiinflamasi $\beta$ -caryophyllene yang dimediasi sistem.....	13
2.3 Struktur 2D dan 3D <i>Caryophyllene</i> (Sumber: <i>PubChem</i> ) .....	13
2.4 Struktur 2D dan 3D <i>Dodecanoic Acid</i> (Sumber: <i>PubChem</i> ) .....	14
2.5 Struktur 2D dan 3D <i>Hexadecanoic Acid</i> (Sumber: <i>PubChem</i> ).....	11
2.6 Model skema kompleks pro-TNF $\alpha$ – TACE hipotetis .....	13
2.7 Ilustrasi diagram sintesis TNF-a dan pensinyalan dua reseptornya.....	14
2.8 Struktur 3D <i>crystal structure of TNF-alpha with a small molecule inhibitor</i>	14
2.9 Struktur Domain <i>Tumor Necrosis Factor Alpha</i> .....	15
2.10 Struktur 2D dan 3D SPD304 (Sumber: <i>PubChem</i> ).....	16
2.11 Kerangka teori Interaksi Senyawa Aktif Kitosan Sisik Ikan Haruan ( <i>Channa striata</i> ) Terhadap <i>Tumor Necrosis Factor Alpha</i> (kajian secara studi <i>in silico</i> ) .....	23
3.1 Kerangka konsep penelitian studi <i>in silico</i> senyawa aktif kitosan sisik ikan Haruan ( <i>Channa striata</i> ) terhadap <i>Tumor Necrosis Factor Alpha</i> .....	26
4.1 Struktur 3D <i>crystal structure of TNF-alpha with a small molecule inhibitor</i> ..	32
4.2 Website PubChem .....	33
4.1 Website Protein Data Bank.....	33
4.4 Website pkCSM.....	33
4.5 Aplikasi PyRx .....	34
4.6 Aplikasi Biovia Discovery Studio.....	34
4.7 Skema alur penelitian studi <i>in silico</i> senyawa aktif kitosan sisik ikan Haruan ( <i>Channa striata</i> ).....	40
5.1 A. TNF- $\alpha$ sebelum preparasi; B. TNF- $\alpha$ setelah preparasi .....	42
5.2 Struktur 3D hasil <i>docking</i> antara <i>caryophyllene</i> dengan TNF- $\alpha$ .....	45
5.3 Struktur 3D hasil <i>docking</i> antara <i>dodecanoic acid</i> dengan TNF- $\alpha$ .....	45
5.4 Struktur 3D hasil <i>docking</i> antara <i>hexadecanoic acid</i> dengan TNF- $\alpha$ .....	46
5.5 Struktur 3D hasil <i>docking</i> antara SPD304 dengan TNF- $\alpha$ .....	42

## DAFTAR LAMPIRAN

### Lampiran

1. Jadwal Kegiatan
2. Rincian Biaya
3. Surat Izin Penelitian
4. Hasil Uji GCMS Senyawa Aktif Kitosan Sisik Ikan Haruan (*Channa striata*)
5. Dokumentasi Proses Penelitian
6. Hasil *Molecular docking* pada Aplikasi PyRx
7. Dokumentasi Proses Visualisasi Hasil *Docking*