

**STUDI *IN SILICO* EKSTRAK BATANG PISANG MAULI (*Musa acuminata*) TERHADAP MATRIX METALLOPROTEINASE-8 (MMP-8) DAN *TISSUE INHIBITOR OF METALLOPROTEINASE-1* (TIMP-1)**

Skripsi

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

Diajukan Oleh  
Lydia Rachma Azhara  
2011111320018



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

**Februari, 2024**

## HALAMAN PERSETUJUAN UJIAN SKRIPSI

Skripsi oleh Lydia Rachma Azhara ini  
Telah diperiksa dan disetujui untuk diseminarkan

Banjarmasin, 5 Februari 2024  
Pembimbing Utama



(drg. Amy Nindia Carabelly, M.Si)  
NIP.19850331 200812 2 003

Banjarmasin, 13 Februari 2024  
Pembimbing Pendamping



(drg. Dewi Puspitasari, M.Si)  
NIP.19820528 200912 2 004

## HALAMAN PENETAPAN PANITIA PENGUJI SKRIPSI

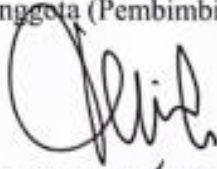
Skripsi oleh Lydia Rachma Azhara  
Telah dipertahankan di depan dewan penguji  
Pada tanggal 29 Februari 2024

Dewan Penguji  
Ketua (Pembimbing Utama)



drg. Amy Nindia Carabelly, M.Si

Anggota (Pembimbing Pendamping)



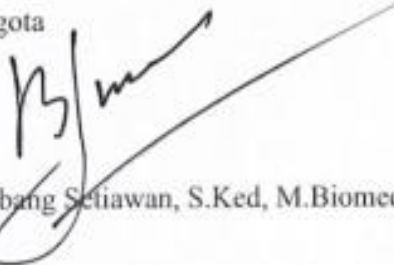
drg. Dewi Puspitasari, M.Si

Anggota



drg. Deby Kania Tri Putri, M.Kes

Anggota



Bambang Setiawan, S.Ked, M.Biomed

**Skripsi**

**STUDI *IN SILICO* EKSTRAK BATANG PISANG MAULI (*Musa acuminata*) TERHADAP MATRIX METALLOPROTEINASE-8 (MMP-8) DAN TISSUE INHIBITOR OF METALLOPROTEINASE-1 (TIMP-1)**


dipersiapkan dan disusun oleh

**Lydia Rachma Azhara**


telah dipertahankan di depan dewan penguji  
pada tanggal **29 Februari 2024**

**Susunan Dewan Penguji**


Pembimbing Utama

  
drg. Amy Nindia Carabelly, M.Si

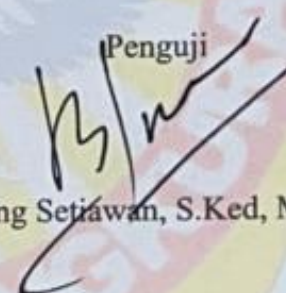
Pembimbing Pendamping

  
drg. Dewi Puspitasari, M.Si

Penguji


  
drg. Deby Kania Tri Putri, M.Kes

Penguji

  
Bambang Setiawan, S.Ked, M.Biomed

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, 29 Februari 2024



Lydia Rachma Azhara

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

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

Nama : Lydia Rachma Azhara  
NIM : 2011111320018  
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* EKSTRAK BATANG PISANG MAULI (*Musa acuminata*) TERHADAP MATRIX METALLOPROTEINASE-8 (MMP-8) DAN *TISSUE INHIBITOR OF METALLOPROTEINASE-1 (TIMP-1)*”**

Beserta perangkat yang ada (jika diperlukan). Dengan Hak Bebas Royalti Noneksklusif ini Universitas Lambung Mangkurat berhak menyimpan, mengalih media/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 : 29 Februari 2024

Yang menyatakan



Lydia Rachma Azhara

## RINGKASAN

### **STUDI *IN SILICO* EKSTRAK BATANG PISANG MAULI (*Musa acuminata*) TERHADAP MATRIX METALLOPROTEINASE-8 (MMP-8) DAN TISSUE INHIBITOR OF METALLOPROTEINASE-1 (TIMP-1)**

Karies adalah penyakit jaringan gigi yang ditandai dengan kerusakan jaringan yang dimulai pada permukaan gigi hingga meluas ke bagian dalam gigi. Karies gigi terjadi karena proses demineralisasi struktur gigi oleh asam yang dihasilkan oleh mikroorganisme. Ketika proses demineralisasi terus menerus berlangsung maka akan menghilangkan kristal apatit yang menutupi kolagen yang akibatnya dapat mengaktifasi *Matrix Metalloproteinase* (MMP). *Tissue Inhibitor of Metalloproteinase* (TIMP) merupakan penghambat endogen yang mengendalikan MMP. Apabila terjadi ketidakseimbangan antara aktivitas MMP dan TIMP, akan menyebabkan terjadinya kondisi patologis, seperti karies. Perkembangan karies dentin ditemukan *Matrix Metalloproteinase-8* (MMP-8) yang berperan dalam menghidrolisis fibril kolagen tipe I yang ada di dentin. Selain itu *Tissue Inhibitor of Metalloproteinase-1* (TIMP-1) turut berperan, di mana jumlah TIMP tidak cukup untuk menghambat MMP dalam mencegah perkembangan karies. Diperlukan penghambat MMP-8 serta stimulasi TIMP-1 untuk mencegah perkembangan karies. Pisang Mauli (*Musa acuminata*) merupakan salah satu tanaman khas dari Kalimantan Selatan yang dapat digunakan sebagai pengobatan penyembuh luka.

Penelitian ini merupakan jenis penelitian eksploratif melalui metode *in silico*. Salah satu metode yang dapat digunakan untuk merancang pembuatan *inhibitor* MMP serta stimulasi TIMP. Metode *in silico* memiliki kelebihan, yaitu lebih murah dan lebih cepat untuk menghasilkan hasil. Penelitian ini menggunakan analisis *molecular docking* dari interaksi reseptor MMP-8 dan TIMP-1 yang didapat dari *website Protein Data Bank* (PDB) dan ligan *choline*, *eucalyptol*, *cinnamic acid*, *caffeic acid*, dan *citral* yang didapat dari *PubChem*. Interaksi antara senyawa ekstrak batang pisang Mauli dengan MMP-8 dan TIMP-1 akan dianalisis menggunakan program *AutoDock Vina* yang terdapat di dalam aplikasi PyRx versi 0.8. Hasil *docking* senyawa ekstrak batang pisang Mauli dengan MMP-8 dan TIMP-1 akan divisualisasikan melalui aplikasi *BIOVIA Discovery Studio V21*.

Hasil penelitian ini menunjukkan interaksi paling baik dari senyawa ekstrak batang pisang Mauli terhadap MMP-8 dan TIMP-1 ialah senyawa *caffeic acid* dengan nilai *binding affinity* sebesar -7,7 kkal/mol terhadap MMP-8 dan -5,9 kkal/mol terhadap TIMP-1. Senyawa *caffeic acid* diprediksi berpotensi menghambat degradasi matriks kolagen penyebab karies dentin.

## SUMMARY

### ***IN SILICO STUDY OF MAULI BANANA STEM EXTRACT (*Musa acuminata*) AGAINST MATRIX METALLOPROTEINASE-8 (MMP-8) AND TISSUE INHIBITOR OF METALLOPROTEINASE-1 (TIMP-1)***

*Caries is a disease of dental tissue characterized by tissue destruction that begins on the surface of the tooth and extends to the inside of the tooth. Dental caries occurs due to the process of demineralization of tooth structure by acids produced by cariogenic bacteria. When the demineralization process continues, it will remove the apatite crystals that cover the collagen which can consequently activate Matrix Metalloproteinase (MMP). Tissue Inhibitor of Metalloproteinase (TIMP) is an endogenous inhibitor that controls MMP. If there is an imbalance between MMP and TIMP activity, it will cause pathological conditions, such as caries. In the development of dentin caries, Matrix Metalloproteinase-8 (MMP-8) is found which plays a role in hydrolyzing type I collagen fibrils in dentin. In addition, Tissue Inhibitor of Metalloproteinase-1 (TIMP-1) also plays a role, where the amount of TIMP is not sufficient to inhibit MMP in preventing caries development. MMP-8 inhibitors as well as TIMP-1 stimulation are required to prevent caries development. Maui banana (*Musa acuminata*) is one of the typical plants from South Kalimantan that can be used as a wound-healing treatment.*

*This research is a type of exploratory research through in silico methods. One method that can be used to design the manufacture of MMP inhibitors and TIMP stimulation. The in silico method has the advantage of being cheaper and faster to produce results. This study uses molecular docking analysis of MMP-8 and TIMP-1 receptor interactions obtained from the Protein Data Bank (PDB) website and ligands choline, eucalyptol, cinnamic acid, caffeic acid, and citral obtained from PubChem. The interaction between Maui banana stem (*Musa acuminata*) extract compounds with MMP-8 and TIMP-1 will be analyzed using the AutoDock Vina program contained in the PyRx application version 0.8. The docking result of Maui banana stem extract compound with MMP-8 and TIMP-1 will be visualized through BIOVIA Discovery Studio V21 application.*

*The results of this study showed that the best interaction of Maui banana stem extract compounds with MMP-8 and TIMP-1 is the caffeic acid compound with a binding affinity value of -7.7 kcal/mol to MMP-8 and -5.9 kcal/mol to TIMP-1. The caffeic acid compound is predicted to have the potential to inhibit the degradation of the collagen matrix that causes dentin caries.*



## ABSTRAK

### STUDI *IN SILICO* EKSTRAK BATANG PISANG MAULI (*Musa acuminata*) TERHADAP MATRIX METALLOPROTEINASE-8 (MMP-8) DAN TISSUE INHIBITOR OF METALLOPROTEINASE-1 (TIMP-1)

Lydia Rachma Azhara, Amy Nindia Carabelly, Dewi Puspitasari, Deby Kania Tri Putri, Bambang Setiawan

**Latar belakang:** Karies gigi terjadi karena proses demineralisasi struktur gigi oleh asam yang dihasilkan oleh mikroorganisme. Ketika proses demineralisasi terus menerus berlangsung maka akan menghilangkan kristal apatit yang menutupi kolagen yang akibatnya dapat mengaktivasi *Matrix Metalloproteinase* (MMP). *Tissue Inhibitor of Metalloproteinase* (TIMP) merupakan penghambat endogen yang mengendalikan MMP. Apabila terjadi ketidakseimbangan antara aktivitas MMP dan TIMP, akan menyebabkan terjadinya kondisi patologis, seperti karies. Perkembangan karies dentin ditemukan *Matrix Metalloproteinase-8* (MMP-8) yang berperan dalam menghidrolisis fibril kolagen tipe I. Selain itu *Tissue Inhibitor of Metalloproteinase-1* (TIMP-1) turut berperan, di mana jumlah TIMP tidak cukup untuk menghambat MMP dalam mencegah perkembangan karies. Senyawa ekstrak batang pisang Mauli (*Musa acuminata*) berpotensi menghambat MMP-8 dan menstimulasi TIMP-1, sebagai kandidat obat untuk mencegah degradasi matriks kolagen penyebab proses karies dentin. Senyawa yang ditemukan dalam pisang Mauli adalah *choline, eucalyptol, cinnamic acid, caffeic acid, dan citral*. **Tujuan:** Mengetahui interaksi senyawa ekstrak batang pisang Mauli terhadap penghambatan MMP-8 dan stimulasi TIMP-1. **Metode:** Penelitian ini merupakan penelitian *in silico* dengan menggunakan metode *molecular docking*. **Hasil:** Uji *drug-likeness* menunjukkan semua senyawa pisang Mauli memenuhi aturan Lipinski. *Molecular docking* senyawa pisang Mauli dapat berikatan baik dengan MMP-8 dan TIMP-1, tetapi tidak lebih baik dari klorheksidin. Senyawa terbaik yang didapatkan adalah *caffeic acid* (*binding affinity* terendah, -7,7 kcal/mol terhadap MMP-8 dan -5,9 kcal/mol terhadap TIMP-1). **Kesimpulan:** Senyawa *caffeic acid* diprediksi memiliki potensi paling baik dalam menghambat degradasi matriks kolagen penyebab karies dentin.

**Kata kunci :** *in silico*, Ekstrak batang pisang Mauli, MMP-8, *Molecular docking*, TIMP-1

## ABSTRACT

### ***IN SILICO STUDY OF MAULI BANANA STEM EXTRACT (*Musa acuminata*) AGAINST MATRIX METALLOPROTEINASE-8 (MMP-8) AND TISSUE INHIBITOR OF METALLOPROTEINASE-1 (TIMP-1)***

**Lydia Rachma Azhara, Amy Nindia Carabelly, Dewi Puspitasari, Deby Kania Tri Putri, Bambang Setiawan**

**Background:** Dental caries occurs due to the process of demineralization of tooth structure by acids produced by microorganism. When the demineralization process continues, it will remove the apatite crystals that cover the collagen which can consequently activate Matrix Metalloproteinase (MMP). Tissue Inhibitor of Metalloproteinase (TIMP) is an endogenous inhibitor that controls MMP. If there is an imbalance between MMP and TIMP activity, it will cause pathological conditions, such as caries. In the development of dentin caries, Matrix Metalloproteinase-8 (MMP-8) is found which plays a role in hydrolyzing type I collagen fibrils. In addition, Tissue Inhibitor of Metalloproteinase-1 (TIMP-1) also plays a role, where the amount of TIMP is not sufficient to inhibit MMP in preventing caries development. Mauli banana (*Musa acuminata*) stem extract compounds have the potential to inhibit MMP-8 and stimulate TIMP-1, as a drug candidate to prevent collagen matrix degradation that causes dentin caries. The compounds found in Mauli banana are choline, eucalyptol, cinnamic acid, caffeic acid, and citral. **Objective:** To determine the interaction of Mauli banana stem extract compounds on MMP-8 inhibition and TIMP-1 stimulation. **Methods:** This research is an *in silico* research using molecular docking method. **Results:** Drug-likeness test showed that all Mauli banana compounds fulfill Lipinski's rule. Molecular docking of Mauli banana compounds can bind well to MMP-8 and TIMP-1, but not better than chlorhexidine. The best compound obtained was caffeic acid (lowest binding affinity, -7.7 kcal/mol to MMP-8 and -5.9 kcal/mol to TIMP-1). **Conclusion:** Caffeic acid compounds are predicted to have the best potential in inhibiting collagen matrix degradation that causes dentinal caries.

**Keywords :** *in silico*, Mauli banana stem extract, MMP-8, Molecular docking TIMP-1

## KATA PENGANTAR

Puji syukur ke hadirat Allah SWT yang telah memberikan rahmat-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul **“STUDI IN SILICO EKSTRAK BATANG PISANG MAULI (*Musa acuminata*) TERHADAP MATRIX METALLOPROTEINASE-8 (MMP-8) DAN TISSUE INHIBITOR OF METALLOPROTEINASE-1 (TIMP-1)”**, 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 terima kasih 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, Dr. drg. Irham Taufiqurrahman M.Si.Med., Sp.BMM., Subsp.T.M.T.M.J. (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. Amy Nindia Carabelly, M.Si dan drg. Dewi Puspitasari, M.Si yang berkenan memberikan saran serta arahan dalam penyelesaian skripsi ini.

Kedua dosen penguji, drg. Deby Kania Tri Putri, M.Kes dan Bapak Bambang Setiawan, S.Ked, M.Biomed 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, Isharwanto, ST., MS. dan dr. Dyah Roselina, Sp.A. Kakak dr. Nadia Kurniani Khairunnisa, serta kedua Adik Ridwan Aji Wicaksono dan Rafi Ilham Pratama yang selalu memberikan perhatian dan dukungan penuh baik moril, materil, motivasi, harapan, dan doa sampai terselesaikannya skripsi ini.

Rekan penelitian departemen patologi mulut Natasha Elisabeth dan Vincentia Devi Denanda yang selalu memberikan dukungan dalam menyelesaikan skripsi ini. Rekan seperjuangan Angkatan 2020 Alveolar dan semua pihak 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, 29 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>xvi</b>
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	<b>xvii</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	<b>xviii</b>
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b> .....	<b>xx</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 .....	6
1.4.1 Manfaat Teoritis.....	6
1.4.2 Manfaat Klinis .....	6
1.4.3 Manfaat Bagi Masyarakat .....	6
<b>BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA</b> .....	<b>7</b>
2.1 Karies .....	7
2.1.1 Proses Karies Gigi.....	7
2.2 <i>Matrix Metalloproteinase-8 (MMP-8)</i> .....	8

2.3	<i>Tissue Inhibitor of Metalloproteinase-1 (TIMP-1)</i> .....	11
2.4	Klorheksidin.....	13
2.5	Tanaman Pisang Mauli ( <i>Musa acuminata</i> ).....	14
2.5.1	Gambaran Umum Pisang Mauli.....	14
2.5.2	Taksonomi Pisang Mauli .....	14
2.5.3	Kandungan Batang Pisang Mauli.....	15
2.5.3.1	<i>Choline</i> .....	15
2.5.3.2	<i>Eucalyptol</i> .....	16
2.5.3.3	<i>Cinnamic Acid</i> .....	17
2.5.3.4	<i>Caffeic Acid</i> .....	17
2.5.3.5	<i>Citral</i> .....	18
2.6	<i>In Silico</i> .....	18
2.6.1	<i>Molecular Docking</i> .....	19
2.6.2	Aplikasi PyRx .....	20
2.6.3	Aplikasi <i>Biovia Discovery Studio</i> .....	20
2.7	<i>Protein Data Bank</i> .....	21
2.8	<i>PubChem</i> .....	21
2.9	Interaksi Ikatan.....	22
2.9.1	Ikatan Hidrogen .....	22
2.9.2	Ikatan Ion .....	22
2.9.3	Ikatan Kovalen.....	23
2.9.4	<i>Van Der Waals</i> .....	23
2.10	<i>Binding Affinity</i> .....	23
2.11	Aturan Lipinski .....	24
2.12	Kerangka Teori .....	25
2.13	Penjelasan Kerangka Teori .....	26
<b>BAB 3</b>	<b>KERANGKA KONSEP .....</b>	<b>29</b>
3.1	Kerangka Konsep.....	29
<b>BAB 4</b>	<b>METODE PENELITIAN.....</b>	<b>30</b>
4.1	Rancangan Penelitian.....	30
4.2	Variabel Penelitian.....	30
4.2.1	Variabel Bebas .....	30
4.2.2	Variabel Terikat .....	31

4.2.3 Variabel Terkendali.....	31
4.2.4 Definisi Operasional .....	31
4.3 Alat Penelitian.....	34
4.3.1 Perangkat Keras .....	34
4.3.2 Perangkat Lunak .....	34
4.4 Bahan Penelitian .....	34
4.4.1 Senyawa Ekstrak Batang Pisang Mauli dan Ligan Pembanding ...	34
4.4.2 <i>Matrix Metalloproteinase-8 (MMP-8)</i> dan <i>Tissue Inhibitor of Metalloproteinase-1 (TIMP-1)</i> .....	35
4.5 Tempat dan Waktu Penelitian.....	37
4.6 Prosedur Penelitian .....	37
4.6.1 Persiapan .....	37
4.6.2 Pengunduhan Reseptor.....	37
4.6.3 Preparasi Reseptor .....	38
4.6.4 Pengunduhan Ligan .....	38
4.6.5 Minimasi Ligan.....	38
4.6.6 Uji <i>Drug-likeness</i> .....	39
4.6.7 Validasi <i>Molecular Docking</i> .....	39
4.6.8 <i>Molecular Docking</i> .....	40
4.6.9 Visualisasi Hasil <i>Docking</i> .....	41
4.7 Alur Penelitian .....	42
4.8 Prosedur Pengambilan atau Pengumpulan Data .....	43
4.9 Cara Pengolahan dan Analisis Data.....	43
<b>BAB 5 HASIL PENELITIAN .....</b>	<b>44</b>
5.1 Data Penelitian .....	44
<b>BAB 6 PEMBAHASAN .....</b>	<b>60</b>
<b>BAB 7 PENUTUP .....</b>	<b>65</b>
7.1 Kesimpulan .....	65
7.2 Saran .....	66
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	
<b>LAMPIRAN</b>	

## DAFTAR SINGKATAN

2D	: 2 Dimensi
3D	: 3 Dimensi
CSV	: <i>Comma Separate Value</i>
ECM	: <i>Extracellular Matrix</i>
LC-HRMS	: <i>Liquid Chromatography High Resolution Mass Spectrometry</i>
MMP	: <i>Matrix Metalloproteinase</i>
MMP-2	: <i>Matrix Metalloproteinase-2</i>
MMP-8	: <i>Matrix Metalloproteinase-8</i>
MMP-9	: <i>Matrix Metalloproteinase-9</i>
NIH	: <i>National Institutes of Health</i>
NLM	: <i>National Library Medicine</i>
PDB	: <i>Protein Data Bank</i>
RAM	: <i>Random Access Memory</i>
Riskesdas	: Riset Kesehatan Dasar
RMSD	: <i>Root Mean Square Deviation</i>
RNA	: <i>Ribonucleic acid</i>
TIMP	: <i>Tissue Inhibitor of Metalloproteinase</i>
TIMP-1	: <i>Tissue Inhibitor of Metalloproteinase-1</i>
TIMP-2	: <i>Tissue Inhibitor of Metalloproteinase-2</i>
TIMP-3	: <i>Tissue Inhibitor of Metalloproteinase-3</i>
TIMP-4	: <i>Tissue Inhibitor of Metalloproteinase-4</i>
WHO	: <i>World Health Organization</i>



## DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
4.1 Definisi Operasional .....	43
4.2 Senyawa Ekstrak Batang Pisang Mauli dan Ligan Pembanding .....	34
4.3 Tabel Identitas <i>Matrix Metalloproteinase-8</i> .....	48
4.4 Tabel Identitas <i>Tissue Inhibitor of Metalloproteinase-1 (TIMP-1)</i> .....	37
5.1 Hasil Uji <i>Drug-Likeness</i> (Aturan Lipinski) .....	45
5.2 Hasil <i>Docking</i> MMP-8 dengan Senyawa Ekstrak Batang Pisang Mauli dan Klorheksidin.....	46
5.3 Hasil <i>Docking</i> TIMP-1 dengan Senyawa Ekstrak Batang Pisang Mauli dan Klorheksidin.....	54

## DAFTAR GAMBAR

Gambar	Halaman
2.1 Struktur <i>Matrix Metalloproteinase-8</i> .....	10
2.2 Struktur 3D <i>Matrix Metalloproteinase-8</i> (Sumber: PDB).....	11
2.3 Tiga bentuk MMP: pro-MMP (tidak aktif), MMP aktif, dan MMP .....	12
2.4 Struktur 2D dan 3D Klorheksidin (Sumber: <i>PubChem</i> ).....	14
2.5 Tanaman Pisang Mauli .....	15
2.6 Struktur 2D dan 3D <i>choline</i> (Sumber: <i>PubChem</i> ).....	16
2.7 Struktur 2D dan 3D <i>eucalyptol</i> (Sumber: <i>PubChem</i> ) .....	16
2.8 Struktur 2D dan 3D <i>cinnamic acid</i> (Sumber: <i>PubChem</i> ) .....	17
2.9 Struktur 2D dan 3D <i>caffeic acid</i> (Sumber: <i>PubChem</i> ) .....	18
2.10 Struktur 2D dan 3D <i>citral</i> (Sumber: <i>PubChem</i> ) .....	18
2.11 Kerangka Teori Studi <i>In Silico</i> Ekstrak Batang Pisang Mauli ( <i>Musa acuminata</i> ) terhadap <i>Matrix Metalloproteinase-8</i> (MMP-8) dan <i>Tissue Inhibitor of Metalloproteinase-1</i> (TIMP-1) .....	25
3.1 Kerangka Konsep Studi <i>In Silico</i> Ekstrak Batang Pisang Mauli ( <i>Musa acuminata</i> ) terhadap <i>Matrix Metalloproteinase-8</i> (MMP-8) dan <i>Tissue Inhibitor of Metalloproteinase-1</i> (TIMP-1).....	29
4.1 Struktur 3D <i>Matrix Metalloproteinase-8</i> .....	36
4.2 Struktur 3D <i>Tissue Inhibitor of Metalloproteinase-1</i> (TIMP-1) .....	36
4.3 Skema Alur Penelitian Studi <i>In Silico</i> Ekstrak Batang Pisang Mauli ( <i>Musa acuminata</i> ) terhadap <i>Matrix Metalloproteinase-8</i> (MMP-8) dan <i>Tissue Inhibitor of Metalloproteinase-1</i> (TIMP-1).....	42

5.1 A. MMP-8 sebelum dipreparasi; B. MMP-8 setelah dipreparasi; C. Struktur TIMP-1 sebelum dipreparasi; D. Struktur TIMP-1 setelah Dipreparasi.....	44
5.2 <i>Docking</i> antara MMP-8 dengan <i>Choline</i> .....	50
5.3 <i>Docking</i> antara MMP-8 dengan <i>Eucalyptol</i> .....	51
5.4 <i>Docking</i> antara MMP-8 dengan <i>Cinnamic Acid</i> .....	51
5.5 <i>Docking</i> antara MMP-8 dengan <i>Caffeic Acid</i> .....	52
5.6 <i>Docking</i> antara MMP-8 dengan <i>Citral</i> .....	52
5.7 <i>Docking</i> antara MMP-8 dengan Klorheksidin .....	53
5.8 <i>Docking</i> antara TIMP-1 dengan <i>Choline</i> .....	56
5.9 <i>Docking</i> antara TIMP-1 dengan <i>Eucalyptol</i> .....	57
5.10 <i>Docking</i> antara TIMP-1 dengan <i>Cinnamic Acid</i> .....	57
5.11 <i>Docking</i> antara TIMP-1 dengan <i>Caffeic acid</i> .....	58
5.12 <i>Docking</i> antara TIMP-1 dengan <i>Citral</i> .....	58
5.13 <i>Docking</i> antara TIMP-1 dengan Klorheksidin.....	59

## DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Jadwal Kegiatan

Lampiran 2. Rincian Biaya

Lampiran 3. Hasil Uji LC-HRMS Hasil *Molecular Docking* pada Aplikasi PyRx

Lampiran 4. Hasil *Molecular Docking* pada Aplikasi PyRx

Lampiran 5. Dokumentasi Proses Penelitian