

**STUDI *IN SILICO* ANTIINFLAMASI SENYAWA AKTIF
EKSTRAK DAUN RAMANIA (*Bouea macrophylla Griff*)
TERHADAP TNF- α**

Skripsi

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

Diajukan Oleh
Nithya Azzahra Vidia Hutagalung
2111111220029



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

April, 2025

**STUDI *IN SILICO* ANTIINFLAMASI SENYAWA AKTIF
EKSTRAK DAUN RAMANIA (*Bouea macrophylla* Griff)
TERHADAP TNF- α**

Skripsi

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

Diajukan Oleh
Nithya Azzahra Vidia Hutagalung
211111220029



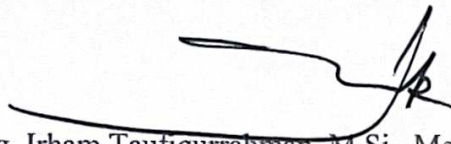
**UNIVERSITAS LAMBUNG MANGKURAT
FAKULTAS KEDOKTERAN GIGI
PROGRAM STUDI KEDOKTERAN GIGI
BANJARMASIN**

April, 2025

HALAMAN PERSETUJUAN UJIAN SKRIPSI

Skripsi oleh Nithya Azzahra Vidia Hutagalung ini
Telah diperiksa dan disetujui untuk diseminarkan

Banjarmasin, Februari 2025
Pembimbing Utama



(Dr. drg. Irham Taufiqurrahman, M.Si., Med., Sp.B.M.M., Subsp.T.M.T.M.J.(K), FICS)
NIP. 197801062009121003

Banjarmasin, Februari 2025
Pembimbing Pendamping



(drg. Isyana Erlita, M.H., Sp.KG)
NIP. 198409212009122005

HALAMAN PENETAPAN PANITIA PENGUJI SKRIPSI

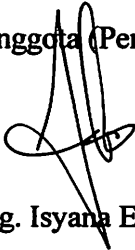
Skripsi oleh Nithya Azzahra Vidia Hutagalung
Telah dipertahankan di depan dewan penguji
Pada tanggal 25 April 2025

Dewan Penguji
Ketua (Pembimbing Utama)



Dr. drg. Irham Taufiqurrahman, M.Si.,Med., Sp.B.M.M., Subsp.T.M.T.M.J.(K), FICS

Anggota (Pembimbing Pendamping)



drg. Isyana Erlita, M.H., Sp.KG

Anggota



Aulia Azizah, S.K.M., M.P.H

Anggota



drg. I Wayan Arya Krishnawan Firdaus., M.Kes

Skripsi

**STUDI *IN SILICO* ANTIINFLAMASI SENYAWA AKTIF EKSTRAK
DAUN RAMANIA (*Bouea Macrophylla Griff*) TERHADAP TNF- α**

dipersiapkan dan disusun oleh

Nithya Azzahra Vidia Hutagalung

telah dipertahankan di depan dewan penguji
pada tanggal 9 Mei 2025

Susunan Dewan Penguji

Pembimbing Utama



Dr. drg. Irham Taufiqurrahman, M.Si.,Med.,
Sp.B.M.M., Subsp.T.M.T.M.J.(K),FICS

Pembimbing Pendamping



drg. Isyana Erlita, M.H., Sp.KG

Penguji




Aulia Azizah, S.K.M., M.P.H

Penguji



drg. I Wayan Arya Krishnawan
Firdaus.,M.Kes

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



drg. Isnur Hatta, M.AP

Wakil Dekan Bidang Akademik

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, 25 April 2025



Nithya Azzahra Vidia Hutagalung

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

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

Nama : Nithya Azzahra Vidia Hutagalung
NIM : 2111111220029
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* ANTIINFLAMASI SENYAWA AKTIF EKSTRAK DAUN RAMANIA (*Bouea Macrophylla Griff*) TERHADAP TNF- α ”

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 : 25 April 2025
Yang menyatakan



Nithya Azzahra Vidia Hutagalung

RINGKASAN

STUDI *IN SILICO* ANTIINFLAMASI SENYAWA AKTIF EKSTRAK DAUN RAMANIA (*Bouea Macrophylla Griff*) TERHADAP TNF- α

Luka adalah cedera di mana kulit dan jaringan di bawahnya mengalami kehilangan kontinuitas akibat cedera atau pembedahan. Proses penyembuhan luka diawali fase inflamasi. *Tumor Necrosis Factor alpha* (TNF- α) adalah salah satu sitokin pleiotropik utama dalam respons inflamasi. Pengobatan luka dapat dengan pemberian obat antiinflamasi. Dalam meminimalisir terjadinya efek samping dari penggunaan obat kimia, tanaman Ramania (*Bouea macrophylla Griffith*) merupakan salah satu tanaman di Indonesia yang dapat dijadikan sebagai obat herbal yang memiliki beberapa senyawa aktif yang mengandung sifat antioksidan, antibakteri, antiinflamasi dan analgesik. Dalam mengetahui efek senyawa aktif ekstrak daun ramania terhadap TNF- α dapat diteliti melalui *in silico* yang merupakan metode penelitian dengan memanfaatkan teknologi komputasi dan database untuk menganalisis probabilitas suatu kandidat obat. Metode *in silico* digunakan pada penelitian ini untuk mengetahui apakah senyawa aktif ekstrak daun ramania (*Bouea macrophylla Griffith*) memiliki potensi sebagai kandidat obat antiinflamasi melalui penghambatan aktivitas TNF- α .

Penelitian ini merupakan penelitian jenis eksperimental dengan metode *in silico* untuk memprediksi apakah senyawa aktif ekstrak daun ramania berinteraksi dengan TNF- α melalui bantuan database dan sistem komputer. Penelitian ini digunakan dengan teknik *molecular docking* yang akan dianalisis melalui visualisasi. Senyawa aktif ekstrak daun ramania dilakukan uji *Lipinski's Rule of Five*, uji toksisitas serta uji farmakokinetika terlebih dahulu kemudian dilanjutkan dengan uji docking. Parameter yang dianalisis dari hasil docking ialah *binding affinity*, RMSD, residu asam amino, jarak ikatan dan jenis interaksi. Hasil penelitian didapatkan bahwa seluruh senyawa aktif ekstrak daun ramania memenuhi aturan Lipinski's Rule of Five dan lulus uji farmakokinetika. Pada hasil uji toksisitas, senyawa *retinol*, *acetate* terdeteksi memiliki potensi sebagai senyawa yang hepatoksik sehingga senyawa *retinol*, *acetate* dipertimbangkan sebagai kandidat obat inflamasi. Hasil docking senyawa aktif ekstrak daun ramania dengan TNF- α menunjukkan senyawa uji memiliki interaksi yang baik dengan TNF- α dan senyawa *Oxiraneundecanoic acid*, *3-pentyl-*, *methyl ester*, *trans-* merupakan senyawa terbaik dari ramania yang memiliki potensi dalam antiinflamasi serta menghambat aktivitas TNF- α walaupun belum dapat menandingi *dexamethasone* sebagai ligan pembanding dalam menghambat aktivitas TNF- α .

SUMMARY

AN IN SILICO STUDY ANTI-INFLAMMATORY ACTIVITY OF ACTIVE COMPOUNDS OF RAMANIA LEAF EXTRACT (BOUEA MACROPHYLLA GRIFF) AGAINST TNF- α

A wound is an injury where the skin and underlying tissues lose continuity due to injury or surgery. The wound healing process begins with the inflammatory phase. Tumor Necrosis Factor alpha (TNF- α) is one of the major pleiotropic cytokines in the inflammatory response. Wound treatment may involve the administration of anti-inflammatory drugs. To minimize the occurrence of side effects from chemical drugs, the Ramania plant (Bouea macrophylla Griffith) is one of the plants in Indonesia plant that can be used as an herbal medicine due to its various active compounds possessing antioxidant, antibacterial, anti-inflammatory, and analgesic properties. As technology advances, pharmacological research is increasingly limited in its use of animal testing due to the high costs and time consumption involved, as well as the requirement for ethical approval for animal experimentation. In knowing the effect of active compounds of ramania leaf extract on TNF- α can be studied through in silico which is a research method by utilizing computational technology and databases to analyze the probability of a drug candidate. In this study, the in silico method was employed to investigate whether the active compounds of Ramania leaf extract (Bouea macrophylla Griffith) have the potential to act as anti-inflammatory drug candidates by inhibiting TNF- α activity.

This research was an experimental study using an in silico method to predict whether the active compounds in Ramania leaf extract interact with TNF- α , using databases and computer systems. Molecular docking techniques were used and analyzed through visualization. The active compounds of ramania leaf extract were subjected to Lipinski's Rule of Five test, toxicity test and pharmacokinetics test first and then followed by docking test. The parameters analyzed from the docking results are binding affinity, RMSD, amino acid residues, bond distances, and types of interactions. The results showed that all active compounds of ramania leaf extract fulfill Lipinski's Rule of Five and pass the pharmacokinetics test. In the toxicity test results, retinol, acetate compounds were detected to have the potential as hepatotoxic compounds so that retinol, acetate compounds were considered as inflammatory drug candidates. The docking results of active compounds of ramania leaf extract with TNF- α showed that the test compounds had good interactions with TNF- α and the compound Oxiraneundecanoic acid, 3-pentyl-, methyl ester, trans is the best compound from ramania that has potential in anti-inflammatory and inhibits TNF- α activity even though it cannot match dexamethasone as a comparator ligand in inhibiting TNF- α activity..

ABSTRAK

STUDI *IN SILICO* ANTIINFLAMASI SENYAWA AKTIF EKSTRAK DAUN RAMANIA (*Bouea Macrophylla Griff*) TERHADAP TNF- α

Nithya Azzahra Vidia Hutagalung, Irham Taufiqurrahman, Isyana Erlita,
Aulia Azizah, I Wayan Arya Krishnawan Firdaus

Latar Belakang: Hasil Riset Kesehatan Dasar (Riskesdas) pada tahun 2018 menyatakan, jenis luka lecet/lebam paling sering terjadi menunjukkan persentase sebesar 64,1%, untuk terkilir berada di urutan kedua dengan persentase 32,8% dan untuk luka iris/robek dengan persentase 20,1%. Proses penyembuhan luka merupakan proses perbaikan jaringan kulit yang rusak akibat luka, terdiri tiga fase yaitu fase inflamasi, proliferasi dan fase maturase. Proses dari pengobatan luka dapat dilakukan dengan pemberian obat herbal. Ramania (*Bouea macrophylla Griffith*) merupakan salah satu tanaman yang dapat dijadikan sebagai obat herbal dengan beberapa kandungannya yaitu *Squalene* (32,11%), *Caryophyllene* (27,48%), *Phytol*, *Retinol*, *Acetate*, Vitamin E dan γ -*himachalene*. **Tujuan:** Menganalisis ikatan senyawa aktif ekstrak daun ramania (*Bouea macrophylla Griffith*) terhadap aktivitas penghambatan TNF- α sebagai antiinflamasi melalui metode *in silico*. **Metode:** Menggunakan metode *molecular docking* yang dilakukan dengan tujuan untuk menganalisis interaksi senyawa aktif ekstrak daun ramania reseptor TNF- α . Berbagai perangkat komputasi digunakan dalam penelitian untuk mendukung hasil yang didapatkan seperti binding affinity, residu amino dan menganalisis efek dalam penghambatannya. **Hasil:** Berdasarkan hasil penelitian, seluruh senyawa aktif ekstrak daun ramania memiliki ikatan dan interaksi yang baik dengan TNF- α , yang artinya memiliki potensi sebagai obat antiinflamasi. **Kesimpulan:** Senyawa *Oxiraneundecanoic acid*, *3-pentyl-*, *methyl ester*, *trans-* merupakan senyawa yang memiliki potensi sebagai kandidat obat antiinflamasi dengan menunjukkan *binding affinity* terbaik dan memiliki ikatan hidrogen yang sama dengan ligan pembanding, namun senyawa tersebut belum dapat mengungguli ligan pembanding sebagai inhibitor dari TNF- α .

Kata kunci : Antiinflamasi, *in silico*, *molecular docking*, ramania, TNF

ABSTRACT

AN IN SILICO STUDY ANTI-INFLAMMATORY ACTIVITY OF ACTIVE COMPOUNDS OF RAMANIA LEAF EXTRACT (BOUEA MACROPHYLLA GRIFF) AGAINST TNF- α

Nithya Azzahra Vidia Hutagalung, Irham Taufiqurrahman, Isyana Erlita, Aulia Azizah, I Wayan Arya Krishnawan Firdaus

Background: Basic Health Research (Riskesmas) indicated that abrasions/bruises were the most frequent type of injury, accounting for 64.1% of cases, followed by sprains at 32.8% and incised/lacerated wounds at 20.1%. The wound healing process, which repairs damaged skin tissue resulting from injury, consists of three phases: the inflammatory phase, the proliferative phase, and the maturation phase. Wound treatment can be achieved through the application of herbal medicines. Ramania (*Bouea macrophylla* Griffith) is one such plant that can be used as an herbal remedy, containing several compounds including Squalene (32.11%), Caryophyllene (27.48%), Phytol, Retinol, Acetate, Vitamin E, and γ -himachalene. **Objective:** Analysing the binding of the active compound of ramania leave extract (*Bouea macrophylla* Griffith) to the activity of TNF- α as an anti-inflammatory agent by the insillico method. **Method:** Molecular docking simulations were performed to evaluate the binding affinity of identified bioactive compounds against the TNF- α receptor. Various computational tools were utilized to assess interaction energies, binding modes, and potential inhibitory effects. **Results:** Based on the results, all of the active compound of ramania leaf extract has a good binding dan interaction with TNF- α , which means it has potential as an anti-inflammatory drug. **Conclusion:** The compound Oxiraneundecanoic acid, 3-pentyl-, methyl ester, trans- is a compound that has potential as an anti-inflammatory drug candidate by showing the best binding affinity and has the same hydrogen bond as the comparator ligand, but the compound has not been able to outperform the comparator ligand as an inhibitor of TNF- α .

Keywords: Anti-inflammatory, in silico, molecular docking, ramania, TNF.

KATA PENGANTAR

Puji syukur ke hadirat Allah SWT yang telah memberikan rahmat-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “**STUDI *IN SILICO* ANTIINFLAMASI SENYAWA AKTIF EKSTRAK DAUN RAMANIA (*Bouea Macrophylla Griff*) TERHADAP TNF- α** ”, 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 1 drg. Isnur Hatta, MAP, Wakil Dekan 2 drg. I Wayan Arya Krishnawan Firdaus, M.Kes dan Wakil Dekan 3 drg. Deby Kania Tri Putri, M.Kes yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.

Koordinator Program Studi Kedokteran Gigi Dr. drg. Bayu Indra Sukmana, M.Kes yang telah memberi kesempatan dan fasilitas dalam pelaksanaan penelitian.

Kedua dosen pembimbing, Dr. drg. Irham Taufiqurrahman, M.Si.,Med., Sp.B.M.M., Subsp.T.M.T.M.J.(K), FICS dan drg. Isyana Erlita, M.H., Sp.KG yang berkenan memberikan saran serta arahan dalam penyelesaian skripsi ini.

Kedua dosen penguji, Aulia Azizah, S.K.M., M.P.H dan drg. I Wayan Arya Krishnawan Firdaus, M.Kes yang telah memberikan kritik dan saran sehingga skripsi ini menjadi semakin baik.

Kedua orangtua saya, Bapak Andri Hutagalung, S.AB, M.AP dan Ibu Sri Lestari, S.H yang selalu memberikan perhatian dan dukungan penuh baik moril, materil dan doa sampai terselesaikannya skripsi ini.

Rekan saya, Salma Septia, Syifaussariyah dan Muhammad Reynaldy Abhista Putra yang selalu kebersamai, mendukung dan memberikan masukan serta semua pihak yang telah membantu proses penelitian 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, 25 April 2025

Penulis

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN SAMPUL DEPAN	i
HALAMAN PERSETUJUAN UJIAN SKRIPSI	iii
HALAMAN PENETAPAN PANITIA PENGUJI SKRIPSI	iv
HALAMAN PERNYATAAN ORIGINALITAS	vi
HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS	vii
RINGKASAN	viii
<i>SUMMARY</i>	ix
ABSTRAK	x
<i>ABSTRACT</i>	xi
KATA PENGANTAR	xii
DAFTAR ISI	xiv
DAFTAR SINGKATAN	xvii
DAFTAR TABEL	xviii
DAFTAR GAMBAR	xix
DAFTAR LAMPIRAN	xx
BAB 1 PENDAHULUAN	1
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.....	4
1.4.1 Manfaat Teoritis	4
1.4.2 Manfaat Praktis	5
1.4.3 Bagi Masyarakat.....	5
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA	6
2.1 <i>Ramania (Bouea macrophylla Griff)</i>	6

2.1.1 Morfologi Ramania	6
2.1.2 Taksonomi Ramania.....	7
2.1.3 Manfaat Ramania	8
2.2 Definisi Luka	8
2.3 Proses Penyembuhan Luka	9
2.3.1 Fase Inflamasi	9
2.3.1.1 Obat Antiinflamasi	12
2.3.2 Fase Proliferasi.....	14
2.3.3 Fase Maturasi / <i>Remodeling</i>	16
2.4 TNF- α	17
2.5 <i>In Silico</i>	18
2.5.1 <i>Molecular Docking</i>	18
2.6 Perangkat Lunak	19
2.6.1 <i>Lipinski's Rule of Five</i>	19
2.6.2 <i>Protein Data Bank</i>	20
2.6.3 PyRx.....	20
2.6.4 <i>BIOVIA Discovery Studio</i>	21
2.6.5 pkCSM	21
2.7 Kerangka Teori.....	23
BAB 3 KERANGKA KONSEP.....	27
3.1 Kerangka Konsep	27
BAB 4 METODE PENELITIAN.....	28
4.1 Rancangan Penelitian	28
4.2 Data Penelitian.....	28
4.3 Variabel Penelitian	28
4.3.1 Variabel Bebas	28
4.3.2 Variabel Terikat	29
4.3.3 Definisi Operasional.....	29
4.4 Alat dan Bahan	29
4.4.1 Alat yang Digunakan.....	29
4.4.2 Bahan yang Digunakan	30
4.5 Tempat dan Waktu Penelitian.....	34

4.6	Prosedur Penelitian	35
4.6.1	Persiapan Ligan	35
4.6.2	Persiapan Reseptor	35
4.6.3	Uji <i>Lipinski's Rule of Five</i> dan ADMET (Absorpsi, Distribusi, Metabolisme, Ekskresi, Toksisitas)	35
4.6.4	Validasi Metode	36
4.6.5	Penambatan Molekul	36
4.6.6	Visualisasi Hasil <i>Docking</i>	36
4.6.7	Tahap Pelaporan	36
4.6.8	Pengolahan dan Analisis Data	37
BAB 5	HASIL PENELITIAN	39
5.1.	Data Penelitian	39
5.1.1	Hasil Uji <i>Lipinski's Rule of Five</i>	40
5.1.2	Hasil Uji Toksisitas Senyawa Aktif <i>Bouea macrophylla Griff.</i>	41
5.1.3	Hasil Uji Farmakokinetika	41
5.1.4	Hasil <i>Molecular Docking</i>	42
5.2.	Analisis dan Hasil Penelitian	46
5.2.1	Hasil Uji <i>Lipinski's Rule of Five</i>	46
5.2.2	Hasil Uji Toksisitas	48
5.2.3	Hasil Uji Farmakokinetika	48
5.2.4	Hasil <i>Molecular Docking</i>	50
BAB 6	PEMBAHASAN	52
6.1	Uji <i>Drug-Likeness</i> dengan <i>Lipinski's Rule of Five</i>	52
6.2	Uji Toksisitas	54
6.3	Uji Farmakokinetika	55
6.4	Hasil <i>Molecular Docking</i>	56
BAB 7	PENUTUP	62
7.1	Kesimpulan	62
7.2	Saran	63
DAFTAR PUSTAKA	64
LAMPIRAN	76

DAFTAR SINGKATAN

SKI	: Survei Kesehatan Indonesia
TNF- α	: <i>Tumor Necrosis Alpha</i>
IL-1 β	: <i>Interleukin 1 beta</i>
ROS	: <i>Reactive oxygen species</i>
NADPH	: <i>Nicotinamide Adenine Dinucleotide</i>
PDGF	: <i>Platelet Derived Growth Factor</i>
TGF	: <i>Transforming Growth Factor</i>
TNF	: <i>Tumour Necrosis Factor</i>
FGF	: <i>Fibroblast growth factors</i>
EGF	: <i>Epidermal growth factor</i>
IGF-1	: <i>Insulin-like Growth Factor-1</i>
VEGF	: <i>Vascular Endothelial Growth Factor</i>
IL-1	: <i>Interleukin-1</i>
IL-6	: <i>Interleukin-6</i>
IL-8	: <i>Interleukin-8</i>
NO	: <i>Nitrit Oxide</i>
PG	: <i>Prostaglandin</i>
DAMP	: <i>Damage Associated Molecules Pattern</i>
PAMP	: <i>Pathogen Spesific Associated Molecules Pattern</i>
TLRs	: <i>Toll like Receptors</i>
NF- κ B	: <i>Nuclear Factor Kappa B</i>
MAPK	: <i>Mktogen Activated Protein Kinase</i>
PMN	: <i>Polimorfonuklear</i>
ECM	: <i>Extracellular Matrix</i>
IFN- γ	: <i>Interferon</i>
MMP	: <i>Matriks Melaproteinase</i>

DAFTAR TABEL

Tabel		Halaman
Tabel 4.1	Definisi Operasional.....	29
Tabel 4.2	Tabel Senyawa Aktif Ekstrak Daun Ramania (<i>Bouea macrophylla Griffith</i>) dan Inhibitor.....	30
Tabel 4.3	Struktur 3D Senyawa Aktif Ekstrak Daun Ramania (<i>Bouea macrophylla Griffith</i>) dan Inhibitor.....	31
Tabel 4.4	Tabel identitas TNF- α	34
Tabel 5.1	Hasil Uji <i>Lipinski's Rule of Five</i>	40
Tabel 5.2	Prediksi toksisitas senyawa aktif daun ramania (<i>Bouea macrophylla Griff</i>) menggunakan perangkat lunak berbasis web pkCSM.....	41
Tabel 5.3	Hasil analisis farmakokinetika senyawa aktif daun ramania (<i>Bouea macrophylla Griff</i>).	41
Tabel 5.4	Hasil <i>Docking</i> TNF- α dengan Senyawa Aktif Ekstrak Daun Ramania (<i>Bouea macrophylla Griffith</i>) dan <i>Dexamethasone</i>	42

DAFTAR GAMBAR

Gambar		Halaman
Gambar 2.1	Daun Ramania (<i>Bouea macrophylla Griffith</i>) (Koleksi Pribadi) ..	7
Gambar 2.2	Kerangka Teori Studi In Silico Antiinflamasi Senyawa Aktif Ekstrak Daun Ramania Terhadap TNF- α	23
Gambar 3. 1	Kerangka Konsep Penelitian <i>In silico</i> Senyawa Aktif Ekstrak Dari Daun Ramania (<i>Bouea macrophylla Griffith</i>) Terhadap TNF- α	27
Gambar 4.1	Struktur 3D TNF- α	34
Gambar 4.2	Alur Penelitian Studi <i>In Silico</i> Antiinflamasi Senyawa Aktif Ekstrak Daun Ramania (<i>Bouea macrophylla Griffith</i>) Terhadap TNF- α	37
Gambar 5.1	Reseptor TNF- α Setelah Dipreparasi	39
Gambar 5.2	a. Struktur 3D hasil docking TNF- α dengan <i>Caryophyllene</i> . b. Struktur 2D hasil docking TNF- α dengan <i>Caryophyllene</i>	44
Gambar 5.3	a. Struktur 3D hasil docking TNF- α dengan <i>Humulene</i> . b. Struktur 2D hasil docking TNF- α dengan <i>Humulene</i>	44
Gambar 5.4	a. Struktur 3D hasil docking TNF- α dengan <i>2-Methyl-cis-7,8-epoxynonadecane</i> . b. Struktur 2D hasil docking TNF- α dengan <i>2-Methyl-cis-7,8-epoxynonadecane</i>	44
Gambar 5.5	a. Struktur 3D hasil docking TNF- α dengan <i>Phytol</i> . b. Struktur 2D hasil docking TNF- α dengan <i>Phytol</i>	44
Gambar 5.6	a. Struktur 3D hasil docking TNF- α dengan <i>Oxiraneundecanoic acid, 3-penthyl-methyl ester, trans-</i> b. Struktur 2D hasil docking TNF- α dengan <i>Oxiraneundecanoic acid, 3-penthyl-methyl ester, trans-</i>	45
Gambar 5.7	a. Struktur 3D hasil docking TNF- α dengan <i>Hexadecanoic acid, ethyl ester</i> . b. Struktur 2D hasil docking TNF- α dengan <i>Hexadecanoic acid, ethyl ester</i>	45
Gambar 5.8	a. Struktur 3D hasil docking TNF- α dengan <i>Squalene</i> . b. Struktur 2D hasil docking TNF- α dengan <i>Squalene</i>	45
Gambar 5.9	a. Struktur 3D hasil docking TNF- α dengan <i>Retinol, acetate</i> . b. Struktur 2D hasil docking TNF- α dengan <i>Retinol, acetate</i>	45
Gambar 5.10	a. Struktur 3D hasil docking TNF- α dengan Vitamin E. b. Struktur 2D hasil docking TNF- α dengan Vitamin E.....	46
Gambar 5.11	a. Struktur 3D hasil docking TNF- α dengan γ - <i>Himachlene</i> . b. Struktur 2D hasil docking TNF- α dengan γ - <i>Himachlene</i>	46
Gambar 5.12	a. Struktur 3D hasil docking TNF- α dengan <i>Dexamethasone</i> . b. Struktur 2D hasil docking TNF- α dengan <i>Dexamethasone</i>	46

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran

1. Rincian Biaya Penelitian
2. Jadwal Kegiatan Penelitian
3. Dokumentasi Proses Pengerjaan Penelitian
4. Dokumentasi ADMET
5. Dokumentasi *Docking*
6. Dokumentasi Visualisasi