LAMPIRAN

@Hak cipta milik IPB University

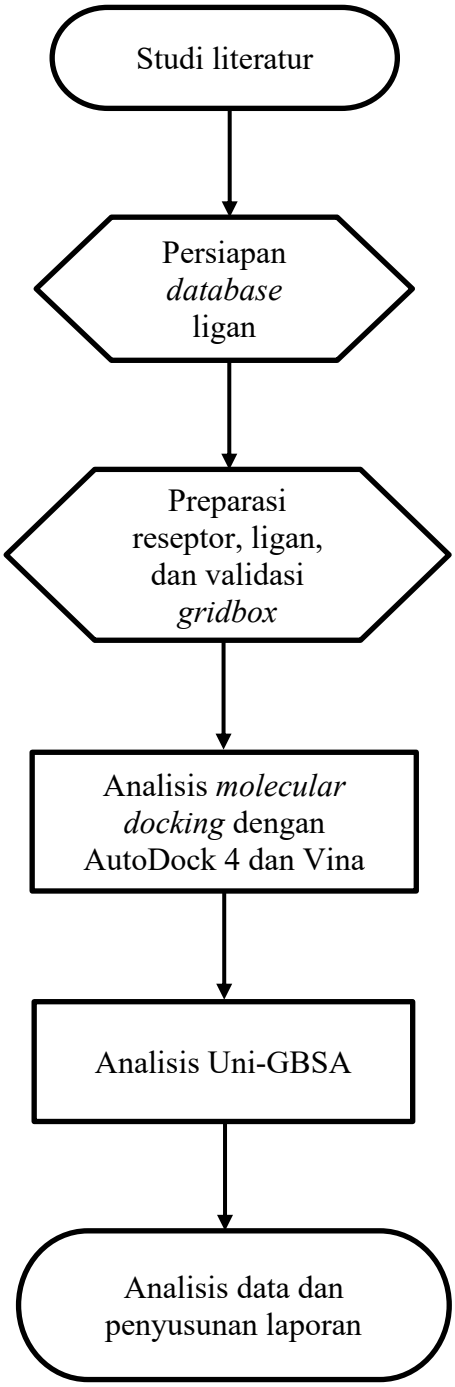
IPB University

IPB University
Bogor Indonesia

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Perpustakaan IPB University

Lampiran 1 Diagram alir penelitian



IPB University
Bogor Indonesia
@Hak cipta milik IPB University
IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
Perpustakaan IPB University

Lampiran 2 100 ligan terbaik hasil *docking* dengan AutoDock Vina dan AutoDock 4

Rank	AutoDock 4		AutoDock Vina	
	Compounds	***Binding Affinity (kcal/mol)***	***Compounds***	***Binding Affinity (kcal/mol)***
1	*(+)-Epilamprolobine N-oxide*	-10,69	*Acutissimin A*	-11
2	*Gelseiridone*	-10,1	*Eugenigrandin A*	-11
3	*Protoxylocarpin F*	-10,02	*Guajavin B*	-10,9
4	*alpha-Carotene*	-10,01	*Lanceolatin A(biflavonoid)*	-10,8
5	*Flavoxanthin*	-9,99	*Theaflavin 3,3'-di-O-gallate*	-10,8
6	*(-)-Epilamprolobine*	-9,86	*Pedunculagin*	-10,7
7	*Lactucain B*	-9,55	*Solamargine*	-10,7
8	*(13'Z)-Capsanthin*	-9,53	*Casuarinin*	-10,6
9	*(9Z)-β,β-Carotene*	-9,46	*Vescalagin*	-10,6
10	*gamma-Carotene*	-9,45	*beta-Chaconine*	-10,5
11	*Chonemorphine*	-9,45	*Samarangenin B*	-10,5
12	*Ganoderiol B*	-9,42	*Hypericin*	-10,4
13	*Vitamin B1*	-9,41	*trans-Diptoindonesin B*	-10,4
14	*Piscidinol A*	-9,33	*Theaflavin 3'-O-gallate*	-10,3
15	*Funtumine*	-9,32	*Castalagin*	-10,2
16	*(13Z)-Capsanthin*	-9,28	*[Epicatechin-(4beta->8)]2-epicatechin-(4beta->6)-catechin*	-10,2
17	*Casuarine*	-9,26	*Casuarictin*	-10,1
18	*Cryptochrome*	-9,25	*Kandelin B1*	-10,1
19	*Sitsirikine*	-9,22	*Nortiliacorinine B*	-10,1
20	*(3S,5R,8S)-5,8-Epoxy-5,8-dihydro-beta,beta-caroten-3-ol*	-9,21	*Punicalagin*	-10,1
21	*Sintaxanthin*	-9,21	*Samarangenin A*	-10,1
22	*25-Hydroxyvitamin D3*	-9,2	*3-O-Galloylepicatechin-(4beta->8)-epicatechin-3-O-gallate*	-10,1
23	*Mutatochrome*	-9,19	*ent-Epiafzelechin-(4alpha->8)-epicatechin*	-10
24	*Tuberostemonine J*	-9,13	*Xylospyrin*	-10
25	*Mutatoxanthin*	-9,09	*Epicatechin-(4beta->6)-epicatechin-(4beta->8)-catechin*	-9,9
26	*Asparagamine A*	-9,05	*Gnemonol D*	-9,9
27	*Hispidol B*	-9,01	*Artonin M*	-9,8
28	*Clausamide I*	-9,01	*Asparagoside A*	-9,8
29	*Stigmast-7-enyl acetate*	-9	*Cinchonain Ic*	-9,8
30	*beta-Cryptoxanthin*	-8,94	*Ent-Epicatechin-(4alpha->8)-catechin*	-9,8
31	*Capitelline*	-8,93	*Hopeaphenol*	-9,8
32	*Cryptocapsin*	-8,91	*Koeniginequinone A*	-9,8

IPB University Bogor Indonesia
@Hak cipta milik IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
IPB University
Perpustakaan IPB University

Rank	AutoDock 4		AutoDock Vina	
	Compounds	***Binding Affinity (kcal/mol)***	***Compounds***	***Binding Affinity (kcal/mol)***
33	*Acarbose*	-8,88	*3,5,7,4'-Tetrahydroxyflavan-(4->8)-3,4,5,7,4'-pentahydroxyflavan*	-9,8
34	*Oxotuberostemonine*	-8,87	*3-O-Galloylepicatechin-(4beta->6)-catechin*	-9,8
35	*Capsanthone*	-8,83	*3-O-Galloylepicatechin-(4beta->8)-epicatechin*	-9,8
36	*Ocotillol II*	-8,81	*Gnemonol E*	-9,7
37	*9-Ribosyl-trans-zeatin*	-8,81	*Robustaflavone*	-9,7
38	*beta-Carotene 5,6-epoxide*	-8,81	*Andalasin A*	-9,6
39	*Lactucaxanthin*	-8,8	*Arecatamnin A1*	-9,6
40	*Teasterone*	-8,8	*Catechin-(4alpha->6)-epicatechin-(4beta->8)-epicatechin*	-9,6
41	*Juliflorine*	-8,79	*cis-Diptoindonesin B*	-9,6
42	*Fouquierol*	-8,79	*Gnemonol K*	-9,6
43	*Lutein*	-8,78	*Mulberrofuran K*	-9,6
44	*19(S)-Hydroxyibogamine*	-8,77	*Vaticanol A*	-9,6
45	*beta-Citraurin*	-8,77	*(+)-N-Methylapateline*	-9,6
46	*Corynantheidaline*	-8,76	*Arecatannin B1*	-9,5
47	*Anisotine*	-8,76	*Cassiamin C*	-9,5
48	*Cerberin*	-8,75	*Catechin-(4alpha->8)-epicatechin-3-O-gallate*	-9,5
49	*Indicine N-oxide*	-8,7	*Chebulagic acid*	-9,5
50	*Protoxylocarpin H*	-8,7	*Cinchonanin IIa*	-9,5
51	*Sapelin E acetate*	-8,7	*(+)-alpha-Viniferin*	-9,5
52	*Febrifugine*	-8,69	*Epicatechin-(4beta->8)-catechin-(4alpha->8)-epicatechin*	-9,5
53	*Tagalsin L*	-8,69	*Glycobismine G*	-9,5
54	*Bismurrayaquinone A*	-8,69	*Gnemonol L*	-9,5
55	*Schleicherastatin 2*	-8,69	*Hinokiflavone*	-9,5
56	*19-Norlanosta-5,24-dien-11-one*	-8,67	*Latifolol*	-9,5
57	*Odoratone*	-8,67	*Parameritannin A1*	-9,5
58	*Khekadaengoside K*	-8,65	*Procyanidin C1*	-9,5
59	*(9'Z)-Capsanthin*	-8,64	*Tellimagrandin I*	-9,5
60	*delta7-Avenasterol*	-8,64	*Yuehchukene*	-9,5
61	*Alstomicine*	-8,63	*3-O-Galloylepicatechin-(4beta->8)-catechin*	-9,5
62	*Hyoscin*	-8,62	*Albanol A*	-9,4
63	*Sarmentamide B*	-8,6	*Bilobetin (C31h20o10)*	-9,4
64	*Withanolide*	-8,58	*Cassiaflavan-(4alpha->6)-epiafzelechin*	-9,4

IPB University — Bogor Indonesia —
@Hak cipta milik IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
Perpustakaan IPB University
IPB University

Rank	AutoDock 4		AutoDock Vina	
	Compounds	Binding Affinity (kcal/mol)	Compounds	Binding Affinity (kcal/mol)
65	*Vitamin D3*	-8,58	*Epicatechin-(4beta->8)-ent-epicatechin*	-9,4
66	*alpha-Sapinine*	-8,57	*Glycobismine-E*	-9,4
67	*Pseudobrucine*	-8,56	*Gnemonol F*	-9,4
68	*21-Deoxyvomilenine*	-8,55	*I-5,II-5,I-7,II-7,I-3',I-4',II-4'-Heptahydroxy-[I-3,II-8]flavanonylflavone*	-9,4
69	*(3S,5R,6S)-5,6-Epoxy-5,6-dihydro-3-hydroxy-8'-apo-beta,psi-carotenal*	-8,54	*Isocryptomerin*	-9,4
70	*10S,13aR-Isotylocrebrine N-oxide*	-8,54	*Isoinophynone*	-9,4
71	*Indicine*	-8,54	*N-Methyltiliamosine*	-9,4
72	*Cathasterone*	-8,53	*Pseudohypericin*	-9,4
73	*1-O-Acetyllycorine*	-8,52	*Aesculitannin B*	-9,3
74	*Ixerisoside D*	-8,51	*Alatanin 1*	-9,3
75	*Capsanthin*	-8,51	*Amentoflavone*	-9,3
76	*Isochrysotricine*	-8,51	*Artonin D*	-9,3
77	*(20S,22R)-5beta,6beta-Epoxy-4beta,14beta,15alpha-trihydroxy-1-oxowith-2,24-dienolide*	-8,5	*Bismurrayaquinone A*	-9,3
78	*Lactucain A*	-8,5	*cis-Miyabenol C*	-9,3
79	*Septicine*	-8,49	*Cyclomorusin*	-9,3
80	*Tigogenin*	-8,47	*ent-Epicatechin-(4alpha->8)-ent-epicatechin*	-9,3
81	*Ajmalicine*	-8,46	*Lagerine*	-9,3
82	*Exserohilone*	-8,46	*Shoreaphenol*	-9,3
83	*Apo-12'-capsorubinal*	-8,44	*Theaflavin 3-O-gallate*	-9,3
84	*(-)-Annonaine*	-8,42	*Corilagin*	-9,2
85	*Haemanthidine*	-8,41	*Cycloartobiloxanthone*	-9,2
86	*Beta-Sitosterone*	-8,4	*(+)-Alstomacroline*	-9,2
87	*(-)-Xylopine*	-8,38	*Epicatechin-(4beta->6)-epicatechin-(4beta->8)-epicatechin*	-9,2
88	*Calystegine N1*	-8,38	*Eugeniin*	-9,2
89	*(-)-Anagyrine*	-8,38	*Guangsangon I*	-9,2
90	*Cassameridine*	-8,37	*Lactucain A*	-9,2
91	*9,10-Dihydroexserohilone*	-8,37	*Prodelphinidin B4*	-9,2
92	*Hordatine B*	-8,37	*Sambicyanin*	-9,2
93	*zeta-Carotene*	-8,37	*Sanggenol O*	-9,2
94	*Protoxylocarpin G*	-8,37	*Sotetsuflavone*	-9,2
95	*Brugine*	-8,36	*Withanone*	-9,2

IPB University Bogor Indonesia
@Hak cipta milik IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
IPB University
Perpustakaan IPB University

Rank	AutoDock 4		AutoDock Vina	
	Compounds	***Binding Affinity (kcal/mol)***	***Compounds***	***Binding Affinity (kcal/mol)***
96	*3-Hydroxysintaxanthin*	-8,36	*5,2',3'-Trihydroxy-7,8-dimethoxyflavone 3'-glucoside*	-9,2
97	*Supinine*	-8,36	*6''-(3-Methyl-2-butenyl)amentoflavone*	-9,2
98	*Euphorbol*	-8,35	*7,7''-Di-O-methylagathisflavone*	-9,1
99	*Calystegine B1*	-8,33	*7-Hydroxy-5-methoxyflavan-(4beta->8)-7-hydroxy-5-methoxyflavan*	-9,1
100	*iso-6-Spectaline*	-8,33	*Artocarpone B*	-9,1
101	*Chloranoside A*	-8,33	*Acarbose*	-5,6

IPB University
Bogor Indonesia
@Hak cipta milik IPB University
IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
Perpustakaan IPB University

Lampiran 3 Hasil pencocokan silang ligan *docking* AutoDock Vina dan AutoDock4

Senyawa Ligan Uji	Spesies	*Binding Affinity* (kcal/mol)	
		AutoDock Vina	AutoDock 4
Hordatine B	*Hordeum Vulgare*	-6,5	-8,37
Juliflorine	*Prosopis Juliflora*	-4,5	-8,79
Capsanthone	*Capsicum Annuum*	-6,8	-8,83
Khekadaengoside K	*Trichosanthes Tricuspidata*	-8,8	-8,65
Cerberin	*Cerbera Manghas*	-6,7	-8,75
(13Z)-Capsanthin	*Asparagus Falcatus*	-6,2	-9,28
Lactucain B	*Lactuca Indica*	-7,2	-9,55
Capsanthin	*Capsicum Annuum*	-6,6	-8,51
3-Hydroxysintaxanthin	*Citrus Sinensis, Persea Americana*	-7,1	-8,36
(+)-Alstomacroline	*Alstonia Macrophylla*	-9,2	-6,2
Cryptocapsin	*Capsicum Annuum*	-6,1	-8,91
Lutein	*Ananas Comosus, Asparagus Officinalis, Cucumis Sativus, Psidium Guajava, Taraxacum Officinale*	-5,4	-8,78
Ocotillol II	*Ceriops Tagal*	-8,2	-8,81
gamma-Carotene	*Capsicum Annuum, Diospyros Kaki, Psidium Guajava, Zea Mays*	-5,4	-9,45
N-Methyltiliamosine	*Tiliacora Racemosa*	-9,4	-4,43
Schleicherastatin 2	*Schleichera Oleosa*	-8,4	-8,69
Sintaxanthin	*Citrus Sinensis*	-6,2	-9,21
Septicine	*Ficus Septica*	-7,3	-8,49
Bismurrayaquinone A	*Murraya Koenigii*	-9,3	-8,69
Bismurrayaquinone A	*Murraya Koenigii*	-9,3	-8,69
Corynantheidaline	*Mitragyna Speciosa*	-6,1	-8,76
(9Z)-β,β-Carotene	*Psidium Guajava*	-7,6	-9,46
9-Ribosyl-trans-zeatin	*Actinidia Chinensis, Beta Vulgaris, Brassica Oleracea, Cichorium Intybus, Dolichos Lablab, Ipomoea Batatas, Mangifera Indica, Medicago Sativa, Nicotiana Tabacum, Phaseolus Mungo, Zea Mays*	-6,5	-8,81
(3S,5R,6S)-5,6-Epoxy-5,6-dihydro-3-hydroxy-8'-apo-beta,psi-carotenal	*Citrus Sinensis*	-6,1	-8,54
Chloranoside A	*Chloranthus Spicatus*	-8,4	-8,33
zeta-Carotene	*Zea Mays*	-4,8	-8,37
alpha-Sapinine	*Sapium Indicum*	-7,8	-8,57
Apo-12'-capsorubinal	*Capsicum Annuum*	-6,3	-8,44
Mutatoxanthin	*Capsicum Annuum*	-6,5	-9,09
(13'Z)-Capsanthin	*Asparagus Falcatus*	-6,7	-9,53

IPB University Bogor Indonesia
@Hak cipta milik IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
IPB University
Perpustakaan IPB University

Senyawa Ligan Uji	Spesies	*Binding Affinity* (kcal/mol)	
		AutoDock Vina	AutoDock 4
Withanone	*Withania Somnifera*	-9,2	-7,4
5,2',3'-Trihydroxy-7,8-dimethoxyflavone 3'-glucoside	*Andrographis Paniculata*	-9,2	-4,01
Withanolide	*Physalis Angulata*	-8,7	-8,58
Gelseiridone	*Gelsemium Elegans*	-7	-10,1
Ixerisoside D	*Cichorium Intybus, Scorzonera Hispanica*	-7,7	-8,51
Ganoderiol B	*Ganoderma Lucidum*	-7,7	-9,42
Supinine	*Heliotropium Indicum*	-6	-8,36
Tagalsin L	*Ceriops Tagal*	-8,3	-8,69
Lactucain A	*Lactuca Indica*	-9,2	-8,5
Lactucain A	*Lactuca Indica*	-9,2	-8,5
Anisotine	*Adhatoda Vasica*	-8,2	-8,76
Sarmentamide B	*Piper Sarmentosum*	-6,7	-8,6
Nortiliacorinine B	*Tiliacora Racemosa*	-10,1	-3,76
Isoinophynone	*Calophyllum Inophyllum*	-9,4	-5,53
beta-Cryptoxanthin	*Capsicum Annuum, Carica Papaya, Medicago Sativa, Psidium Guajava, Zea Mays*	-7,5	-8,94
iso-6-Spectaline	*Cassia Spectabilis*	-5,1	-8,33
Beta-Sitosterone	*Cassia Multijuga*	-8,1	-8,4
Protoxylocarpin F	*Xylocarpus Granatum*	-7,2	-10,02
Cryptochrome	*Averrhoa Carambola*	-7	-9,25
Tuberostemonine J	*Stemona Tuberosa*	-7,9	-9,13
Hyoscin	*Datura Metel*	-6,5	-8,62
25-Hydroxyvitamin D3	*Solanum Melongena*	-7,8	-9,2
Asparagoside A	*Asparagus Officinalis*	-9,8	-1,84
Protoxylocarpin H	*Xylocarpus Granatum*	-7,6	-8,7
Brugine	*Bruguiera Sexangula*	-5,7	-8,36
Pseudobrucine	*Strychnos Lucida*	-7,5	-8,56
Piscidinol A	*Cedrela Sinensis*	-7,1	-9,33
Mutatochrome	*Carica Papaya, Chrysanthemum Coronarium, Citrus Sinensis*	-7,6	-9,19
Sambicyanin	*Didymocarpus Corchorifolia, Rubus Idaeus*	-9,2	-5,18
Sotetsuflavone	*Cycas Revoluta*	-9,2	-2,15
Protoxylocarpin G	*Xylocarpus Granatum*	-8,2	-8,37
(-)-Epilamprolobine	*Sophora Tomentosa*	-7,2	-9,86
Stigmast-7-enyl acetate	*Hordeum Vulgare*	-8	-9
Lactucaxanthin	*Lactuca Sativa*	-6,8	-8,8
Yuehchukene	*Murraya Paniculata*	-9,5	-7,6
Tigogenin	*Agave Ixtli, Solanum Nigrum*	-8	-8,47
Cyclomorusin	*Artocarpus Altilis, Morus Australis*	-9,3	-5,84
Lagerine	*Lagerstroemia Indica*	-9,3	-7,16

IPB University — Bogor Indonesia —
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
@Hak cipta milik IPB University
IPB University
Perpustakaan IPB University

Senyawa Ligan Uji	Spesies	*Binding Affinity* (kcal/mol)	
		AutoDock Vina	AutoDock 4
Vitamin D3	*Solanum Melongena*	-6,8	-8,58
Haemanthidine	*Zephyranthes Citrina*	-6,6	-8,41
Capitelline	*Hedyotis Capitellata*	-7,5	-8,93
Exserohilone	*Dactyloctenium Aegyptium*	-7,4	-8,46
Euphorbol	*Euphorbia Antiquorum*	-7,9	-8,35
beta-Citraurin	*Capsicum Annuum*	-5,9	-8,77
Clausamide I	*Clausena Lansium*	-6,5	-9,01
Alatanin 1	*Dioscorea Alata*	-9,3	3,24
(9'Z)-Capsanthin	*Asparagus Falcatus*	-5,8	-8,64
Vitamin B1	*Coix Lacryma-Jobi, Lycopersicum Esculentum, Nelumbo Nucifera, Nothopanax Scutellarium, Symphytum Officinale*	-5,7	-9,41
9,10-Dihydroexserohilone	*Dactyloctenium Aegyptium*	-7,4	-8,37
7-Hydroxy-5-methoxyflavan-(4beta->8)-7-hydroxy-5-methoxyflavan	*Daemonorops Draco*	-9,1	-4,19
Teasterone	*Zea Mays*	-7,2	-8,8
Isochrysotricine	*Hedyotis Capitellata*	-6,6	-8,51
Ajmalicine	*Rauvolfia Serpentina*	-7	-8,46
7,7''-Di-O-methylagathisflavone	*Agathis Robusta*	-9,1	0,71
(3S,5R,8S)-5,8-Epoxy-5,8-dihydro-beta,beta-caroten-3-ol	*Psidium Guajava*	-5,4	-9,21
(20S,22R)-5beta,6beta-Epoxy-4beta,14beta,15alpha-trihydroxy-1-oxowith-2,24-dienolide	*Physalis Peruviana*	-8,6	-8,5
Febrifugine	*Dichroa Febrifuga*	-7,1	-8,69
Cassameridine	*Cassytha Filiformis*	-7,9	-8,37
Indicine	*Heliotropium Indicum*	-6,1	-8,54
Sitsirikine	*Alstonia Angustifolia*	-6,4	-9,22
1-O-Acetyllycorine	*Crinum Latifolium*	-7,4	-8,52
6''-(3-Methyl-2-butenyl)amentoflavone	*Calophyllum Venulosum*	-9,2	-1,08
19(S)-Hydroxyibogamine	*Tabernaemontana Corymbosa*	-7	-8,77
delta7-Avenasterol	*Coffea Liberica*	-8,2	-8,64
Koeniginequinone A	*Murraya Koenigii*	-9,8	-7,17
(-)-Xylopine	*Annona Cherimolia*	-7,5	-8,38
(+)-N-Methylapateline	*Bacopa Monniera*	-9,6	-4,61
(+)-Epilamprolobine N-oxide	*Sophora Tomentosa*	-7,6	-10,69

IPB University — Bogor Indonesia —
@Hak cipta milik IPB University
IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
Perpustakaan IPB University

Senyawa Ligan Uji	Spesies	*Binding Affinity* (kcal/mol)	
		AutoDock Vina	AutoDock 4
Calystegine N1	*Lycium Chinense*	-6,3	-8,38
Indicine N-oxide	*Heliotropium Indicum*	-6,8	-8,7
Cathasterone	*Catharanthus Roseus*	-6,7	-8,53
Casuarine	*Casuarina Equisetifolia*	-5,9	-9,26
beta-Carotene 5,6-epoxide	*Carica Papaya, Citrus Sinensis, Cyphomandra Betacea, Mangifera Indica*	-5,7	-8,81
Alstomicine	*Alstonia Macrophylla*	-6,4	-8,63
10S,13aR-Isotylocrebrine N-oxide	*Ficus Septica*	-6,8	-8,54
Odoratone	*Cedrela Odorata*	-7,8	-8,67
alpha-Carotene	*Asparagus Officinalis, Diospyros Kaki, Elaeis Guineensis, Zea Mays*	-6,8	-10,01
Fouquierol	*Ceriops Tagal*	-8,2	-8,79
Oxotuberostemonine	*Stemona Tuberosa*	-7	-8,87
Albanol A	*Broussonetia Papyrifera, Morus Macroura*	-9,4	-0,5
Sapelin E acetate	*Cedrela Sinensis*	-7,2	-8,7
Asparagamine A	*Asparagus Racemosus*	-7,7	-9,05
Hispidol B	*Cedrela Sinensis*	-7,7	-9,01
21-Deoxyvomilenine	*Rauvolfia Perakensis, Vinca Minor*	-6,9	-8,55
Calystegine B1	*Calonyction Bona Nox, Ipomoea Obscura, Lycium Chinense, Merremia Umbellata, Porana Volubilis*	-6,1	-8,33
Sanggenol O	*Morus Australis*	-9,2	-5,95
(-)-Annonaine	*Annona Reticulata*	-7,4	-8,42
Funtumine	*Funtumia Elastica*	-6,8	-9,32
Chonemorphine	*Chonemorpha Macrophylla*	-6,1	-9,45
Shoreaphenol	*Shorea Robusta*	-9,3	-0,45
Xylospyrin	*Diospyros Chloroxylon, Diospyros Ebenaster*	-10	-2,23
Glycobismine G	*Glycosmis Citrifolia*	-9,5	-1,63
Mulberrofuran K	*Morus Macroura*	-9,6	3,26
Bilobetin (C31h20o10)	*Ginkgo Biloba*	-9,4	-0,12
I-5,II-5,I-7,II-7,I-3',I-4',II-4'-Heptahydroxy-[I-3,II-8]flavanonylflavone	*Garcinia Nervosa*	-9,4	1,9
19-Norlanosta-5,24-dien-11-one	*Cucumis Melo*	-8,2	-8,67
Cassiamin C	*Cassia Siamea*	-9,5	-1,19
Flavoxanthin	*Tagetes Erecta, Taraxacum Officinale*	-6,3	-9,99
(-)-Anagyrine	*Sophora Tomentosa*	-6,5	-8,38

IPB University Bogor Indonesia
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
@Hak cipta milik IPB University
IPB University
Perpustakaan IPB University

Senyawa Ligan Uji	Spesies	*Binding Affinity* (kcal/mol)	
		AutoDock Vina	AutoDock 4
Hypericin	*Hypericum Perforatum*	-10,4	-0,85
Cassiaflavan-(4alpha->6)-epiafzelechin	*Cassia Fistula*	-9,4	1,7
Glycobismine-E	*Glycosmis Citrifolia*	-9,4	-3,12
Artocarpone B	*Artocarpus Champeden*	-9,1	-1,66
Amentoflavone	*Calophyllum Inophyllum, Elateriospermum Tapos*	-9,3	0,9
Artonin M	*Artocarpus Rigida*	-9,8	-2,39
Artonin D	*Artocarpus Heterophyllus*	-9,3	5,48
Lanceolatin A(biflavonoid)	*Tephrosia Purpurea*	-10,8	0,27
3,5,7,4'-Tetrahydroxyflavan-(4->8)-3,4,5,7,4'-pentahydroxyflavan	*Salacia Chinensis*	-9,8	2,26
Cycloartobiloxanthone	*Artocarpus Altilis, Artocarpus Kemando, Artocarpus Rigida*	-9,2	-1,62
Pseudohypericin	*Hypericum Perforatum*	-9,4	-0,21
(+)-alpha-Viniferin	*Vitis Vinifera*	-9,5	9,65
ent-Epiafzelechin-(4alpha->8)-epicatechin	*Cassia Fistula, Cassia Javanica*	-10	1,94
cis-Miyabenol C	*Foeniculum Vulgare*	-9,3	3,69
beta-Chaconine	*Solanum Tuberosum*	-10,5	6408,39
Guangsangon I	*Morus Macroura*	-9,2	3,87
Theaflavin 3-O-gallate	*Camellia Sinensis*	-9,3	7,87
ent-Epicatechin-(4alpha->8)-ent-epicatechin	*Cassia Fistula, Metroxylon Sagu*	-9,3	2,98
Corilagin	*Aleurites Cordata, Punica Granatum, Rhus Semialata, Ricinus Communis, Sapium Sebiferum, Terminalia Chebula*	-9,2	5,01
trans-Diptoindonesin B	*Dryobalanops Oblongifolia*	-10,4	34,64
Cinchonain Ic	*Cinchona Succirubra*	-9,8	0,05
Epicatechin-(4beta->8)-ent-epicatechin	*Cassia Fistula*	-9,4	3,44
Isocryptomerin	*Cupressus Funebris*	-9,4	33562237,79
Andalasin A	*Morus Macroura*	-9,6	3,43
cis-Diptoindonesin B	*Dryobalanops Oblongifolia*	-9,6	4,25
Gnemonol E	*Gnetum Gnemon*	-9,7	50572370,09
Theaflavin 3'-O-gallate	*Camellia Sinensis*	-10,3	5,17
Gnemonol L	*Gnetum Gnemon*	-9,5	684,69
Ent-Epicatechin-(4alpha->8)-catechin	*Metroxylon Sagu*	-9,8	5,33

IPB University
Bogor Indonesia
@Hak cipta milik IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
Perpustakaan IPB University

Senyawa Ligan Uji	Spesies	*Binding Affinity* (kcal/mol)	
		AutoDock Vina	AutoDock 4
Solamargine	*Solanum Melongena, Solanum Nigrum*	-10,7	33795360,47
[Epicatechin-(4beta->8)]2-epicatechin-(4beta->6)-catechin	*Areca Catechu*	-10,2	50948083,28
3-O-Galloylepicatechin-(4beta->8)-epicatechin	*Vitis Vinifera*	-9,8	8,7
Chebulagic acid	*Terminalia Chebula*	-9,5	122,82
Gnemonol K	*Gnetum Gnemon*	-9,6	49,59
Cinchonanin IIa	*Cinchona Succirubra*	-9,5	27,77
Hopeaphenol	*Balanocarpus Heimii, Doona Odorata, Shorea Robusta*	-9,8	155728,09
3-O-Galloylepicatechin-(4beta->6)-catechin	*Vitis Vinifera*	-9,8	53,74
Samarangenin A	*Syzygium Aqueum*	-10,1	10,23
Procyanidin C1	*Camellia Sinensis, Cinchona Succirubra, Dioscorea Cirrhosa, Eriobotrya Japonica, Theobroma Cacao, Vitis Vinifera*	-9,5	489,52
Latifolol	*Gnetum Gnemon*	-9,5	33767098,09
Prodelphinidin B4	*Camellia Sinensis, Trifolium Repens, Vicia Faba*	-9,2	7,8
Vescalagin	*Castanea Sativa*	-10,6	891,59
Robustaflavone	*Agathis Robusta*	-9,7	512,28
3-O-Galloylepicatechin-(4beta->8)-catechin	*Vitis Vinifera*	-9,5	10,45
Pedunculagin	*Tibouchina Semidecandra*	-10,7	46,65
Aesculitannin B	*Parameria Laevigata*	-9,3	571,23
Gnemonol F	*Gnetum Gnemon*	-9,4	737,11
Vaticanol A	*Vatica Rassak*	-9,6	9,85
Tellimagrandin I	*Psidium Guajava, Syzygium Aromaticum*	-9,5	7,94
Epicatechin-(4beta->6)-epicatechin-(4beta->8)-epicatechin	*Vitis Vinifera*	-9,2	100037,07
Casuarinin	*Psidium Guajava*	-10,6	17,12
Kandelin B1	*Cinchona Succirubra*	-10,1	17882,09
Arecatamnin A1	*Illicium Anisatum, Vitis Vinifera*	-9,6	1616,57
Theaflavin 3,3'-di-O-gallate	*Camellia Sinensis*	-10,8	23,83
Gnemonol D	*Gnetum Gnemon*	-9,9	67128994,09

IPB University — Bogor Indonesia —
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
@Hak cipta milik IPB University
IPB University
Perpustakaan IPB University

Senyawa Ligan Uji	Spesies	*Binding Affinity* (kcal/mol)	
		AutoDock Vina	AutoDock 4
Catechin-(4alpha->8)-epicatechin-3-O-gallate	*Camellia Sinensis, Vitis Vinifera*	-9,5	14,81
Samarangenin B	*Syzygium Aqueum*	-10,5	5121,82
Catechin-(4alpha->6)-epicatechin-(4beta->8)-epicatechin	*Dioscorea Cirrhosa*	-9,6	818,69
Eugeniin	*Syzygium Aromaticum*	-9,2	84,86
3-O-Galloylepicatechin-(4beta->8)-epicatechin-3-O-gallate	*Camellia Sinensis, Vitis Vinifera*	-10,1	32,59
Epicatechin-(4beta->6)-epicatechin-(4beta->8)-catechin	*Areca Catechu, Dioscorea Cirrhosa, Illicium Anisatum, Vitis Vinifera*	-9,9	2044,8
Guajavin B	*Psidium Guajava*	-10,9	84179161,19
Casuarictin	*Psidium Guajava, Syzygium Aromaticum, Tibouchina Semidecandra*	-10,1	621,72
Arecatannin B1	*Areca Catechu*	-9,5	17079820,39
Castalagin	*Castanea Sativa*	-10,2	1302,65
Acarbose			

IPB University
Bogor Indonesia
@Hak cipta milik IPB University
IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
Perpustakaan IPB University

Lampiran 4 Senyawa hasil analisis Uni-GBSA

Senyawa Ligan Uji	Spesies	ΔG_{bind} (kcal/mol)	
		AutoDock Vina	AutoDock 4
akarbosa hasil vina		-45.07940632	-50.18762176
Akarbosa hasil ad4		-45.07920632	-50.18608368
Hordatine B	*Hordeum Vulgare*	-39.30159752	-54.34985528
Juliflorine	*Prosopis Juliflora*	-40.2054468	-49.68958576
Capsanthone	*Capsicum Annuum*	-39.41821656	-48.23962696
Khekadaengoside K	*Trichosanthes Tricuspidata*	-41.02037376	-47.69539544
Cerberin	*Cerbera Manghas*	-42.8408088	-47.53603712
(13Z)-Capsanthin	*Asparagus Falcatus*	-33.7568772	-46.95016096
Lactucain B	*Lactuca Indica*	-31.33978416	-42.29450992
Capsanthin	*Capsicum Annuum*	-35.69149528	-41.7804092
3-Hydroxysintaxanthin	*Citrus Sinensis, Persea Americana*	-39.84424928	-40.62075592
(+)-Alstomacroline	*Alstonia Macrophylla*	-37.31813208	-39.4177748
Cryptocapsin	*Capsicum Annuum*	-31.81752704	-38.92457664
Lutein	*Ananas Comosus, Asparagus Officinalis, Cucumis Sativus, Psidium Guajava, Taraxacum Officinale*	-31.81752704	-37.96825824
Ocotillol II	*Ceriops Tagal*	-34.78647576	-37.582222
gamma-Carotene	*Capsicum Annuum, Diospyros Kaki, Psidium Guajava, Zea Mays*	-32.09038776	-37.55641856
N-Methyltiliamosine	*Tiliacora Racemosa*	-37.63191312	-37.33709792
Schleicherastatin 2	*Schleichera Oleosa*	-40.46981648	-37.2447416
Sintaxanthin	*Citrus Sinensis*	-31.41606744	-37.1472124
Septicine	*Ficus Septica*	-39.42228192	-37.07007264
Bismurrayaquinone A	*Murraya Koenigii*	-34.4332168	-36.79344352
Bismurrayaquinone A	*Murraya Koenigii*	-34.4333168	-36.7931148
Corynantheidaline	*Mitragyna Speciosa*	-33.12250856	-36.69136872
(9Z)-β,β-Carotene	*Psidium Guajava*	-39.48825824	-36.42342712
9-Ribosyl-trans-zeatin	*Actinidia Chinensis, Beta Vulgaris, Brassica Oleracea, Cichorium Intybus, Dolichos Lablab, Ipomoea Batatas, Mangifera Indica, Medicago Sativa, Nicotiana Tabacum,*	-45.16743632	-35.7948808

IPB University — Bogor Indonesia —
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
@Hak cipta milik IPB University
IPB University
Perpustakaan IPB University

Senyawa Ligan Uji	Spesies	ΔG_{bind} (kcal/mol)	
		AutoDock Vina	AutoDock 4
	Phaseolus Mungo, Zea Mays		
(3S,5R,6S)-5,6-Epoxy-5,6-dihydro-3-hydroxy-8'-apo-beta,psi-carotenal	*Citrus Sinensis*	-32.8774792	-35.78936208
Chloranoside A	*Chloranthus Spicatus*	-38.9096716	-35.73165712
zeta-Carotene	*Zea Mays*	-35.79533296	-35.61193032
alpha-Sapinine	*Sapium Indicum*	-38.06682512	-35.57434912
Apo-12'-capsorubinal	*Capsicum Annuum*	-37.93771768	-35.18415288
Mutatoxanthin	*Capsicum Annuum*	-32.62045464	-35.17803288
(13'Z)-Capsanthin	*Asparagus Falcatus*	-32.88066936	-34.8862328
Withanone	*Withania Somnifera*	-40.78002616	-34.38536888
5,2',3'-Trihydroxy-7,8-dimethoxyflavone 3'-glucoside	*Andrographis Paniculata*	-36.33997152	-34.00785288
Withanolide	*Physalis Angulata*	-36.42009416	-33.91361984
Gelseiridone	*Gelsemium Elegans*	-41.2911844	-33.80792688
Ixerisoside D	*Cichorium Intybus, Scorzonera Hispanica*	-40.8183864	-33.65638384
Ganoderiol B	*Ganoderma Lucidum*	-36.76750936	-33.37069312
Supinine	*Heliotropium Indicum*	-34.52997624	-33.22519872
Tagalsin L	*Ceriops Tagal*	-30.6320008	-32.8950272
Lactucain A	*Lactuca Indica*	-31.44731384	-32.82787208
Lactucain A	*Lactuca Indica*	-31.45208376	-32.8277728
Anisotine	*Adhatoda Vasica*	-33.49579024	-32.69772584
Sarmentamide B	*Piper Sarmentosum*	-32.9686812	-32.62401056
Nortiliacorinine B	*Tiliacora Racemosa*	-40.11548096	-32.3541036
Isoinophynone	*Calophyllum Inophyllum*	-34.01665048	-32.31696224
beta-Cryptoxanthin	*Capsicum Annuum, Carica Papaya, Medicago Sativa, Psidium Guajava, Zea Mays*	-35.32303528	-31.96252856
iso-6-Spectaline	*Cassia Spectabilis*	-37.94069072	-31.88275048
Beta-Sitosterone	*Cassia Multijuga*	-34.96242232	-31.82790808
Protoxylocarpin F	*Xylocarpus Granatum*	-38.90184952	-31.6688672
Cryptochrome	*Averrhoa Carambola*	-33.2512532	-31.53713096
Tuberostemonine J	*Stemona Tuberosa*	-37.67213952	-31.452776
Hyoscin	*Datura Metel*	-28.9502024	-31.39203504
25-Hydroxyvitamin D3	*Solanum Melongena*	-38.34017192	-31.35099128

IPB University Bogor Indonesia
@Hak cipta milik IPB University
IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
Perpustakaan IPB University

Senyawa Ligan Uji	Spesies	ΔG_{bind} (kcal/mol)	
		AutoDock Vina	AutoDock 4
Asparagoside A	*Asparagus Officinalis*	-44.52609368	-31.11485152
Protoxylocarpin H	*Xylocarpus Granatum*	-34.9383224	-30.97687592
Brugine	*Bruguiera Sexangula*	-33.47366448	-30.83688928
Pseudobrucine	*Strychnos Lucida*	-34.54209232	-30.78723272
Piscidinol A	*Cedrela Sinensis*	-33.67754312	-30.69443104
Mutatochrome	*Carica Papaya, Chrysanthemum Coronarium, Citrus Sinensis*	-42.58767224	-30.69008216
Sambicyanin	*Didymocarpus Corchorifolia, Rubus Idaeus*	-43.7692804	-30.68482872
Sotetsuflavone	*Cycas Revoluta*	-27.10426504	-30.2907048
Protoxylocarpin G	*Xylocarpus Granatum*	-40.74223128	-30.20189064
(-)-Epilamprolobine	*Sophora Tomentosa*	-31.63177336	-30.17776872
Stigmast-7-enyl acetate	*Hordeum Vulgare*	-39.19467448	-30.06571728
Lactucaxanthin	*Lactuca Sativa*	-37.45536112	-30.05071112
Yuehchukene	*Murraya Paniculata*	-26.46658992	-30.0103432
Tigogenin	*Agave Ixtli, Solanum Nigrum*	-24.16599152	-30.0030244
Cyclomorusin	*Artocarpus Altilis, Morus Australis*	-32.54281512	-29.95961368
Lagerine	*Lagerstroemia Indica*	-34.40034896	-29.66877768
Vitamin D3	*Solanum Melongena*	-35.14289792	-29.58022832
Haemanthidine	*Zephyranthes Citrina*	-30.54993032	-29.57912256
Capitelline	*Hedyotis Capitellata*	-37.96676392	-29.50908224
Exserohilone	*Dactyloctenium Aegyptium*	-26.6895372	-29.435374
Euphorbol	*Euphorbia Antiquorum*	-38.43851992	-29.29833936
beta-Citraurin	*Capsicum Annuum*	-30.20939232	-29.1609
Clausamide I	*Clausena Lansium*	-26.71224568	-28.70583432
Alatanin 1	*Dioscorea Alata*	-56.69838848	-28.6417592
(9'Z)-Capsanthin	*Asparagus Falcatus*	-29.42744664	-28.54778544
Vitamin B1	*Coix Lacryma-Jobi, Lycopersicum Esculentum, Nelumbo Nucifera, Nothopanax Scutellarium,*	-34.29823632	-28.40263672

@Hak cipta milik IPB University
IPB University
IPB University — Bogor Indonesia
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
Perpustakaan IPB University

Senyawa Ligan Uji	Spesies	ΔG_{bind} (kcal/mol)	
		AutoDock Vina	AutoDock 4
	Symphytum Officinale		
9,10-Dihydroexserohilone	*Dactyloctenium Aegyptium*	-27.13692344	-28.37667912
7-Hydroxy-5-methoxyflavan-(4beta->8)-7-hydroxy-5-methoxyflavan	*Daemonorops Draco*	-36.39865744	-28.29370952
Teasterone	*Zea Mays*	-34.2965736	-28.24793896
Isochrysotricine	*Hedyotis Capitellata*	-26.22804224	-27.9098244
Ajmalicine	*Rauvolfia Serpentina*	-25.93497024	-27.84132032
7,7''-Di-O-methylagathisflavone	*Agathis Robusta*	-37.80740696	-27.70314048
(3S,5R,8S)-5,8-Epoxy-5,8-dihydro-beta,beta-caroten-3-ol	*Psidium Guajava*	-30.08722736	-27.70131448
(20S,22R)-5beta,6beta-Epoxy-4beta,14beta,15alpha-trihydroxy-1-oxowith-2,24-dienolide	*Physalis Peruviana*	-40.55891232	-27.66355888
Febrifugine	*Dichroa Febrifuga*	-34.79264536	-27.63358848
Cassameridine	*Cassytha Filiformis*	-32.07358328	-27.47665016
Indicine	*Heliotropium Indicum*	-25.58605072	-27.40168336
Sitsirikine	*Alstonia Angustifolia*	-27.96141344	-27.38465984
1-O-Acetyllycorine	*Crinum Latifolium*	-30.57161448	-26.7771364
6''-(3-Methyl-2-butenyl)amentoflavone	*Calophyllum Venulosum*	-29.83021544	-26.777124
19(S)-Hydroxyibogamine	*Tabernaemontana Corymbosa*	-26.4501764	-26.77487624
delta7-Avenasterol	*Coffea Liberica*	-34.31414016	-26.74744888
Koeniginequinone A	*Murraya Koenigii*	-31.13002152	-26.52140704
(-)-Xylopine	*Annona Cherimolia*	-30.01831288	-26.42464384
(+)-N-Methylapateline	*Bacopa Monniera*	-29.05473232	-26.37672448
(+)-Epilamprolobine N-oxide	*Sophora Tomentosa*	-32.00605304	-26.31069872
Calystegine N1	*Lycium Chinense*	-28.30723512	-26.11515712
Indicine N-oxide	*Heliotropium Indicum*	-35.02046992	-25.8072376
Cathasterone	*Catharanthus Roseus*	-30.97165232	-25.59015792
Casuarine	*Casuarina Equisetifolia*	-28.89276048	-25.5453708
beta-Carotene 5,6-epoxide	*Carica Papaya, Citrus Sinensis, Cyphomandra*	-34.59160328	-25.41675344

IPB University — Bogor Indonesia —
@Hak cipta milik IPB University
IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
Perpustakaan IPB University

Senyawa Ligan Uji	Spesies	ΔG_{bind} (kcal/mol)	
		AutoDock Vina	AutoDock 4
	Betacea, Mangifera Indica		
Alstomicine	*Alstonia Macrophylla*	-29.0108296	-25.29356608
10S,13aR-Isotylocrebrine N-oxide	*Ficus Septica*	-26.93752632	-24.90315744
Odoratone	*Cedrela Odorata*	-34.5385632	-24.90097736
alpha-Carotene	*Asparagus Officinalis, Diospyros Kaki, Elaeis Guineensis, Zea Mays*	-33.5713024	-24.68619784
Fouquierol	*Ceriops Tagal*	-42.37634448	-24.48364784
Oxotuberostemonine	*Stemona Tuberosa*	-26.5993264	-24.2726388
Albanol A	*Broussonetia Papyrifera, Morus Macroura*	-19.97143184	-24.13418672
Sapelin E acetate	*Cedrela Sinensis*	-30.42871968	-24.1117028
Asparagamine A	*Asparagus Racemosus*	-32.54892776	-23.92694856
Hispidol B	*Cedrela Sinensis*	-43.8364124	-23.79490208
21-Deoxyvomilenine	*Rauvolfia Perakensis, Vinca Minor*	-28.2620816	-23.67962664
Calystegine B1	*Calonyction Bona Nox, Ipomoea Obscura, Lycium Chinense, Merremia Umbellata, Porana Volubilis*	-25.4923256	-23.53919912
Sanggenol O	*Morus Australis*	-30.98841592	-22.320044
(-)-Annonaine	*Annona Reticulata*	-27.66804072	-22.0095948
Funtumine	*Funtumia Elastica*	-28.20784488	-21.19432392
Chonemorphine	*Chonemorpha Macrophylla*	-20.31070704	-21.07804856
Shoreaphenol	*Shorea Robusta*	-22.9955848	-20.92393192
Xylospyrin	*Diospyros Chloroxylon, Diospyros Ebenaster*	-27.77136728	-20.53224336
Glycobismine G	*Glycosmis Citrifolia*	-32.51986328	-20.1013092
Mulberrofuran K	*Morus Macroura*	-22.5719644	-19.71396464
Bilobetin (C31h20o10)	*Ginkgo Biloba*	-20.63969264	-19.62278888
I-5,II-5,I-7,II-7,I-3',I-4',II-4'-Heptahydroxy-[I-3,II-8]flavanonylflavone	*Garcinia Nervosa*	-12.52529144	-19.30166408

IPB University — Bogor Indonesia —
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
@Hak cipta milik IPB University
IPB University
Perpustakaan IPB University

Senyawa Ligan Uji	Spesies	ΔG_{bind} (kcal/mol)	
		AutoDock Vina	AutoDock 4
19-Norlanosta-5,24-dien-11-one	*Cucumis Melo*	-31.00007712	-19.26106808
Cassiamin C	*Cassia Siamea*	-22.92924	-19.1349764
Flavoxanthin	*Tagetes Erecta, Taraxacum Officinale*	-32.35550512	-19.02089976
(-)-Anagyrine	*Sophora Tomentosa*	-20.62586264	-18.33892176
Hypericin	*Hypericum Perforatum*	-19.87833088	-18.18335512
Cassiaflavan-(4alpha->6)-epiafzelechin	*Cassia Fistula*	-26.6721632	-17.99905328
Glycobismine-E	*Glycosmis Citrifolia*	-36.15564728	-16.8640928
Artocarpone B	*Artocarpus Champeden*	-26.80319608	-16.66194824
Amentoflavone	*Calophyllum Inophyllum, Elateriospermum Tapos*	-18.2439868	-16.65325368
Artonin M	*Artocarpus Rigida*	-35.02419304	-16.56451048
Artonin D	*Artocarpus Heterophyllus*	-34.27845616	-14.13701984
Lanceolatin A(biflavonoid)	*Tephrosia Purpurea*	-26.427918	-14.12571432
3,5,7,4'-Tetrahydroxyflavan-(4->8)-3,4,5,7,4'-pentahydroxyflavan	*Salacia Chinensis*	-26.07813304	-13.86314752
Cycloartobiloxanthone	*Artocarpus Altilis, Artocarpus Kemando, Artocarpus Rigida*	-22.90994112	-13.7795092
Pseudohypericin	*Hypericum Perforatum*	-13.68843664	-12.87223688
(+)-alpha-Viniferin	*Vitis Vinifera*	-20.4717164	-12.53370248
ent-Epiafzelechin-(4alpha->8)-epicatechin	*Cassia Fistula, Cassia Javanica*	-10.53768544	-10.0481324
cis-Miyabenol C	*Foeniculum Vulgare*	-27.45653152	-9.82478752
beta-Chaconine	*Solanum Tuberosum*	-61.57558288	-9.7787044
Guangsangon I	*Morus Macroura*	-26.16373	-9.32053568
Theaflavin 3-O-gallate	*Camellia Sinensis*	-16.78903312	-8.46323784
ent-Epicatechin-(4alpha->8)-ent-epicatechin	*Cassia Fistula, Metroxylon Sagu*	-10.54251152	-7.62418768
Corilagin	*Aleurites Cordata, Punica Granatum, Rhus Semialata,*	-22.23275656	-7.13780176

IPB University Bogor Indonesia
@Hak cipta milik IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
IPB University
Perpustakaan IPB University

Senyawa Ligan Uji	Spesies	ΔG_{bind} (kcal/mol)	
		AutoDock Vina	AutoDock 4
	Ricinus Communis, Sapium Sebiferum, Terminalia Chebula		
trans-Diptoindonesin B	*Dryobalanops Oblongifolia*	-17.92325856	-7.01212224
Cinchonain Ic	*Cinchona Succirubra*	-20.7181716	-6.91700016
Epicatechin-(4beta->8)-ent-epicatechin	*Cassia Fistula*	-20.95893928	-6.19237296
Isocryptomerin	*Cupressus Funebris*	-40.06131216	-4.6776628
Andalasin A	*Morus Macroura*	-14.73106984	-3.5879124
cis-Diptoindonesin B	*Dryobalanops Oblongifolia*	-22.1282048	-2.85026504
Gnemonol E	*Gnetum Gnemon*	-19.58057416	-2.69143472
Theaflavin 3'-O-gallate	*Camellia Sinensis*	-9.99432216	-1.5395952
Gnemonol L	*Gnetum Gnemon*	-23.71422456	-1.25446168
Ent-Epicatechin-(4alpha->8)-catechin	*Metroxylon Sagu*	-9.40523608	-0.0924852
Solamargine	*Solanum Melongena, Solanum Nigrum*	-62.43654112	0
[Epicatechin-(4beta->8)]2-epicatechin-(4beta->6)-catechin	*Areca Catechu*	-11.56236056	0
3-O-Galloylepicatechin-(4beta->8)-epicatechin	*Vitis Vinifera*	-20.66090424	1.340646
Chebulagic acid	*Terminalia Chebula*	-21.03618656	1.60683104
Gnemonol K	*Gnetum Gnemon*	-17.00710376	4.03645632
Cinchonanin IIa	*Cinchona Succirubra*	-16.96724096	4.49599728
Hopeaphenol	*Balanocarpus Heimii, Doona Odorata, Shorea Robusta*	-21.02785192	5.63645104
3-O-Galloylepicatechin-(4beta->6)-catechin	*Vitis Vinifera*	-15.08923856	6.14492616
Samarangenin A	*Syzygium Aqueum*	-6.69471128	6.78429768
Procyanidin C1	*Camellia Sinensis, Cinchona Succirubra, Dioscorea Cirrhosa, Eriobotrya Japonica, Theobroma Cacao, Vitis Vinifera*	-4.48487912	6.83339568

IPB University Bogor Indonesia
@Hak cipta milik IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
Perpustakaan IPB University

Senyawa Ligan Uji	Spesies	ΔG_{bind} (kcal/mol)	
		AutoDock Vina	AutoDock 4
Latifolol	*Gnetum Gnemon*	-20.91660552	9.0754188
Prodelphinidin B4	*Camellia Sinensis, Trifolium Repens, Vicia Faba*	2.5478292	9.7253572
Vescalagin	*Castanea Sativa*	-1.55094904	11.40779896
Robustaflavone	*Agathis Robusta*	-21.73334688	13.41128296
3-O-Galloylepicatechin-(4beta->8)-catechin	*Vitis Vinifera*	-7.4517984	13.59845664
Pedunculagin	*Tibouchina Semidecandra*	-8.93240712	16.96585784
Aesculitannin B	*Parameria Laevigata*	-9.89634976	17.0261928
Gnemonol F	*Gnetum Gnemon*	-18.93098488	18.09224016
Vaticanol A	*Vatica Rassak*	-21.20184728	18.35384344
Tellimagrandin I	*Psidium Guajava, Syzygium Aromaticum*	-8.23579464	18.57029728
Epicatechin-(4beta->6)-epicatechin-(4beta->8)-epicatechin	*Vitis Vinifera*	-8.98729456	19.3474536
Casuarinin	*Psidium Guajava*	5.51658008	19.93281424
Kandelin B1	*Cinchona Succirubra*	-9.68140592	24.06016848
Arecatamnin A1	*Illicium Anisatum, Vitis Vinifera*	-13.468384	24.56369104
Theaflavin 3,3'-di-O-gallate	*Camellia Sinensis*	-1.4606688	25.32087792
Gnemonol D	*Gnetum Gnemon*	-24.24466992	30.25132512
Catechin-(4alpha->8)-epicatechin-3-O-gallate	*Camellia Sinensis, Vitis Vinifera*	-7.37717096	31.20874072
Samarangenin B	*Syzygium Aqueum*	1.53441808	33.08710512
Catechin-(4alpha->6)-epicatechin-(4beta->8)-epicatechin	*Dioscorea Cirrhosa*	-1.60304808	39.29857352
Eugeniin	*Syzygium Aromaticum*	14.08457096	42.71196112
3-O-Galloylepicatechin-(4beta->8)-epicatechin-3-O-gallate	*Camellia Sinensis, Vitis Vinifera*	0.92766656	43.0718216
Epicatechin-(4beta->6)-epicatechin-(4beta->8)-catechin	*Areca Catechu, Dioscorea Cirrhosa, Illicium Anisatum, Vitis Vinifera*	-5.24177224	43.51363128
Guajavin B	*Psidium Guajava*	18.85630152	46.7087688

IPB University
Bogor Indonesia
@Hak cipta milik IPB University
IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
Perpustakaan IPB University

Senyawa Ligan Uji	Spesies	ΔG_{bind} (kcal/mol)	
		AutoDock Vina	AutoDock 4
Casuarictin	*Psidium Guajava, Syzygium Aromaticum, Tibouchina Semidecandra*	-1.98702152	49.49883224
Arecatannin B1	*Areca Catechu*	-13.92584128	55.74993704
Castalagin	*Castanea Sativa*	-2.05102496	57.6769444

IPB University
Bogor Indonesia
@Hak cipta milik IPB University
IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
Perpustakaan IPB University

Lampiran 5 Residu asam amino metode AutoDock 4

Senyawa Ligan Potensial	Interaksi Residu Asam Amino			
	Ikatan Hidrogen	Ikatan Hidrofobik	Ikatan van der Waals	Interaksi Lain
Akarbosa (kontrol)	Conventional H-bond: R526, D542, D443, H600. Carbon H-bond: D327, D542, D443	Y299, F575, W406	N207, T544, A576, G541, W539, W441, R598, I364, I328, S448, F450, D203, M444	Unfavorable donor-donor: T 205, H 600
Cerberin	Conventional H-bond: T544, R526, D327, W406, T205. Carbon H-bond: D443	Y299, I328, I364, M444	A576, G541, W441, H600, W539, F575, D542, F450, D203, T204, S448, D443	-
Khekadaen goside K	Conventional H-bond: D327, D443, W406, D542, R526, R202. Carbon H-bond: D327, R526	-	I364, H600, W441, W539, K480, F450, D203, T205, T204, M444, F575, Y299, I328	-
Juliflorine	Conventional H-bond: D542, H600, D327. Carbon H-bond: D203, D443	K480, W406, F450	P206, T205, N543, A576, T204, R202, M444, R526, W539, W441, I364, D203	Salt bridge/ attractive charge /Pi-cation: D542, F575, Y299, D443
Hordatine B	Conventional H-bond: D443, D327, D203, T205	A576	D366, I364, M444, R526, T204, Y214, W441, H600, F575, W539, G602, Q603, Y605	Attractive charge/Pi-anion/Pi-cation: D327, Y299, D542, D203, D443. Unfavorable donor-donor: I328, W406
9-Ribosyl-trans-zeatin	Conventional H-bond: D327, D542, D203, T205. Carbon H-bond: R526, F575, Y214	W406, M444	W539, D443, G541, P206, T204, W441, H600, Y299	Pi-anion: D542. Sulfur-X: M444
Capsanthone	Conventional H-bond: R526, W406	A576, Y299	D203, F450, S448, T544, W539, W441, H600, D327, I364, I328, D366, D443, F575, Y605, G602, Q603, K480, Y214,	Unfavorable donor-donor pada gugus kiri

IPB University
Bogor Indonesia
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
@Hak cipta milik IPB University
IPB University
Perpustakaan IPB University

Senyawa Ligan Potensial	Interaksi Residu Asam Amino			
	Ikatan Hidrogen	Ikatan Hidrofobik	Ikatan van der Waals	Interaksi Lain
			T204, T205, M444, D542	
3-Hydroxysin taxanthin	Conventional H-bond: D203, H600	A576, Y299	S448, T204, T205, Y214, T544, F450, M444, Y605, Q603, G602, R526, D542, D443, W539, W441, F575, W406, D327, I364, I328	-
Schleichera statin 2	Conventional H-bond: R526, D542, Y605	Y299, F575, W406, W441, I328, I364, A576	M444, D203, D443, H600, W539, T205, T544, Q603, L577, D327	-
Septicine	Carbon H-bond: D443, R526	Y605, F575, Y299	Q603, G602, A576, T205, T204, K480, F450, M444, W539, W441, H600, W406	Salt bridge/ attractive charge /Pi-anion: D203, D542, D443
(9Z)-β,β-Carotene	-	W406, F575, M444, R526, W441, A576, Y299	F450, K480, Y605, D542, R202, D203, T204, T205, D327, I364, D443, H600, W539	-

@Hak cipta milik IPB University
IPB University
IPB University — Bogor Indonesia —
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
Perpustakaan IPB University

Lampiran 6 Residu asam amino metode AutoDock Vina

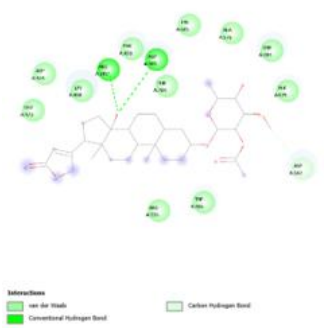
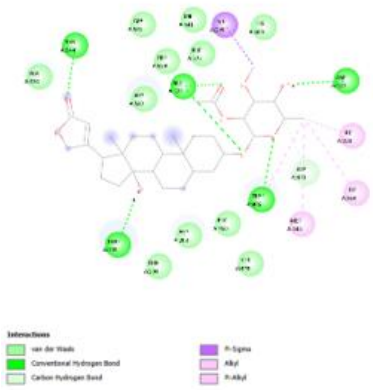
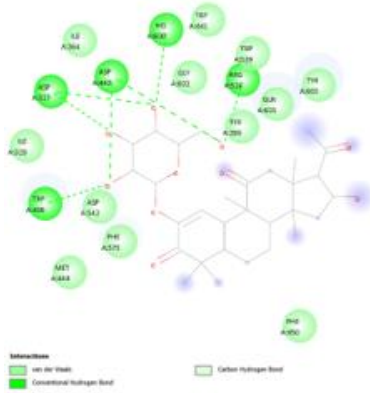
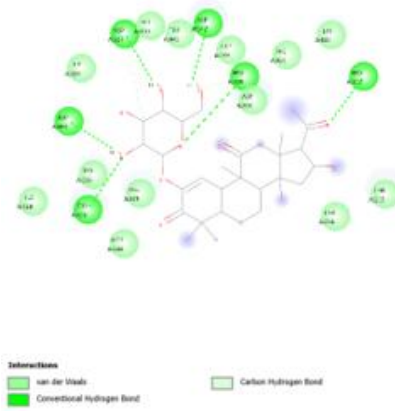
Senyawa Ligan Potensial	Interaksi Residu Asam Amino			
	Ikatan Hidrogen	Ikatan Hidrofobik	Ikatan van der Waals	Interaksi Lain
Akarbosa (kontrol)	Conventional H-bond: R526, D542, D443, H600. Carbon H-bond: D327, D542, D443	Y299, F575, W406	N207, T544, A576, G541, W539, W441, R598, I364, I328, S448, F450, D203, M444	Unfavorable donor-donor: T205, H600
Cerberin	Conventional H-bond: R202, D203; Carbon H-bond: D542	-	D474, L473, K480, F450, Y605, A576, T205, F575, T204, R526, W406	-
Khekadaen goside K	Conventional H-bond: D327, D443, H600, R526, W406	-	I364, I328, D542, F575, M444, G602, W441, W539, Y299, Q603, Y605, F450	-
Juliflorine	Conventional H-bond: D203, D542, D443	F450, W406	Y605, Q603, Y299, F575, I364, R202, T204, T205, R526, M444	-
Hordatine B	Conventional H-bond: D203, D542, T205, Q603, R526; Carbon H-bond: T204, Y299	W406, M444, F450	Y605, G604, G602, F575, A576, D443	-
9-Ribosyl-trans-zeatin	Conventional H-bond: R202, D327, H600, D542; Pi-Donor H-bond: W406, Y 299	F575	K480, D203, T204, R526, D443, W539, W441, I328, I364	Pi-Anion: D542; Pi-Sulfur: M444
Capsanthone	-	Y605, F575, W406, F450	R202, K480, T204, T205, D203, D542, A576, G602, Q603, R526, M444, Y299	-
3-Hydroxysintaxanthin	Conventional H-bond: T205, R202	Y605, F450, W406	Q603, A576, F575, Y299, D542, D203, M444, T204, R526, K480	-
Schleichera statin 2	Conventional H-bond: D542	I364, Y299, F575, I328, W406, F450	W539, R526, D327, D443, W441, H600, M444, D203, K480	-
Septicine	Carbon H-bond: Q603, D443, T205	Y299, F575	A576, Y605, F450, K480, T204, M444, R526, D542, W406,	Pi-Anion: D203

IPB University
Bogor Indonesia
@Hak cipta milik IPB University
IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
Perpustakaan IPB University

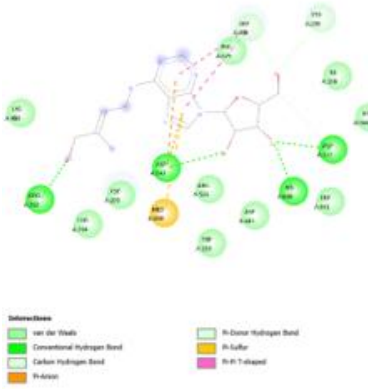
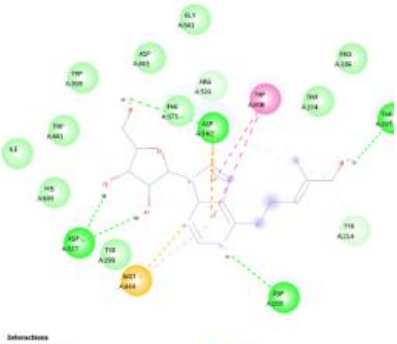
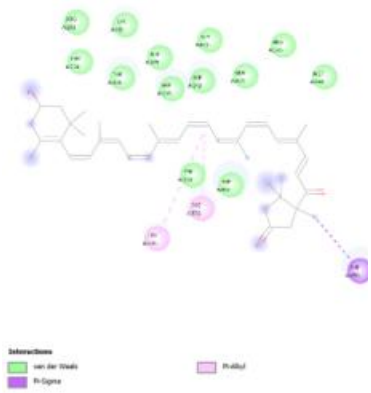
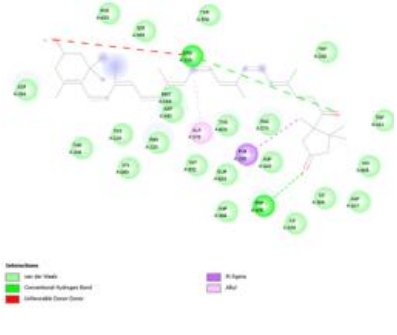
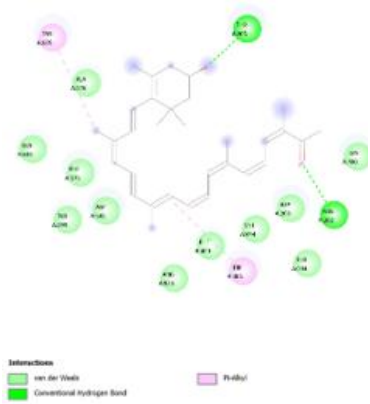
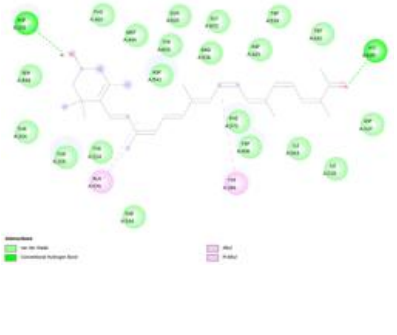
Senyawa Ligan Potensial	Interaksi Residu Asam Amino			
	Ikatan Hidrogen	Ikatan Hidrofobik	Ikatan van der Waals	Interaksi Lain
			D327, H600, W441, W539	
(9Z)-β,β-Carotene	-	Y299, F575, F450	E404, R334, W406, D542, Q603, Y605, A576, T205, T204, D203, R202, K480, S448	-

@Hak cipta milik IPB University
IPB University
IPB University — Bogor Indonesia —
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
Perpustakaan IPB University

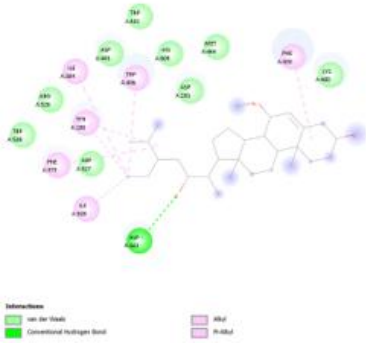
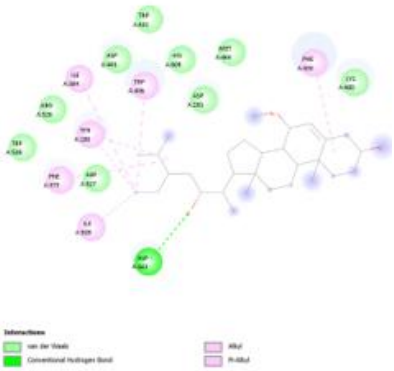
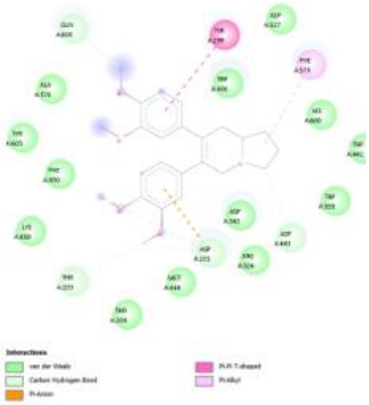
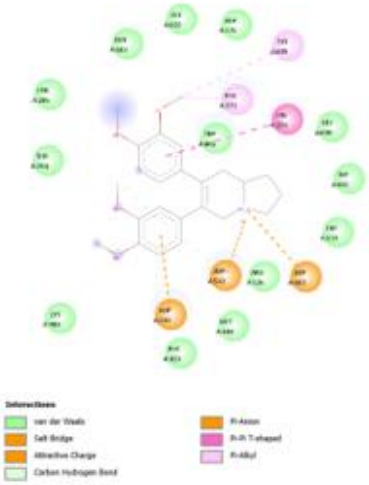
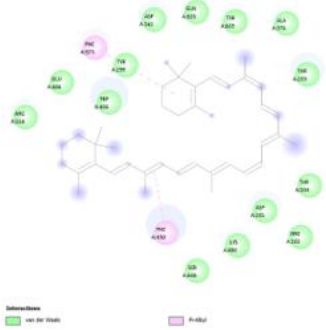
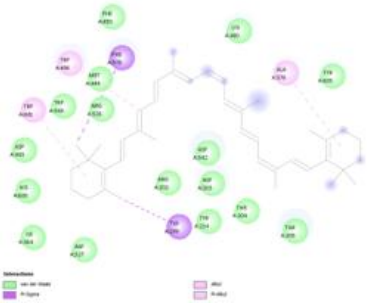
Lampiran 7 Visualisasi 2D interaksi ligan uji dan reseptor metode AutoDock Vina (kiri) dan AutoDock 4 (kanan)

Senyawa Ligan Potensial	Visualisasi AutoDock Vina	Visualisasi Autodock 4
Cerberin		
Khekadaengoside K		
Juliflorine		

IPB University
Bogor Indonesia
@Hak cipta milik IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
IPB University
Perpustakaan IPB University

Senyawa Ligan Potensial	Visualisasi AutoDock Vina	Visualisasi Autodock 4
9-Ribosyl-trans-zeatin		
Capsanthone		
3-Hydroxysintaxanthin		

@Hak cipta milik IPB University
IPB University
IPB University — Bogor Indonesia —
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
Perpustakaan IPB University

Senyawa Ligan Potensial	Visualisasi AutoDock Vina	Visualisasi Autodock 4
Schleicherastatin 2		
Septicine		
(9Z)-β,β-Carotene		

IPB University
Bogor Indonesia
@Hak cipta milik IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
IPB University
Perpustakaan IPB University

@Hak cipta milik IPB University

IPB University

IPB University
Bogor Indonesia

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
   a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
   b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Perpustakaan IPB University

RIWAYAT HIDUP

Penulis dilahirkan di Kota Bogor pada 18 Agustus 2004 sebagai anak ke dua dari empat bersaudara dari pasangan Bapak Abdul Muis dan Ibu Sri Wardatun. Pendidikan sekolah menengah atas (SMA) ditempuh di sekolah SMAIT Insantama dan lulus pada tahun 2022. Pada tahun 2022, penulis diterima sebagai mahasiswa program sarjana (S1) di Program Studi Biokimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam di IPB. Selama mengikuti program S1, penulis aktif mengikuti kegiatan organisasi di antaranya sebagai anggota Departemen Adkesmah Ormawa Eksekutif PKU 2023, Ketua Departemen Adkesmah BEM FMIPA IPB 2024, serta Bendahara Umum BEM FMIPA IPB 2025. Penulis juga aktif mengikuti kepanitiaan, baik di tingkat fakultas maupun universitas, seperti Pemilihan Raya PKU IPB 2022 dan G-Family 2024. Sebagai upaya untuk memperluas wawasan dan pengalaman, penulis juga mengikuti kegiatan magang di Laboratorium Tanah dan Tanaman Divisi *Environmental Policy and Governance Section* (EPG), SEAMEO BIOTROP Indonesia dengan judul "Pengujian pH, karbon (C-organik) dan fosfor (P-bray) pada tanah mineral di area Seameo Biotrop". Selain itu, penulis juga berkesempatan mengikuti program *Winter School* melalui program CNU WILL 2026 di Chungnam National University, Korea Selatan, serta program *Summer School* melalui program KNU *Summer Program* 2026 di Kangwon National University, Korea Selatan.

IPB University
Bogor Indonesia
@Hak cipta milik IPB University
IPB University
Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.
Perpustakaan IPB University