



**MODIFIKASI SELULOSA SECARA *MOLECULAR DOCKING*  
MENGUNAKAN AGEN *CROSSLINK* ASAM  
DIKARBOKSILAT**

**SKRIPSI**

Oleh

**MARGA ROMADHONA  
NIM 111810301025**

**JURUSAN KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS JEMBER  
2016**



**MODIFIKASI SELULOSA SECARA *MOLECULAR DOCKING*  
MENGUNAKAN AGEN *CROSSLINK* ASAM  
DIKARBOKSILAT**

**SKRIPSI**

diajukan guna melengkapi tugas akhir dan memenuhi salah satu syarat  
untuk menyelesaikan Program Studi Kimia (S1)  
dan mencapai gelar Sarjana Sains

Oleh:

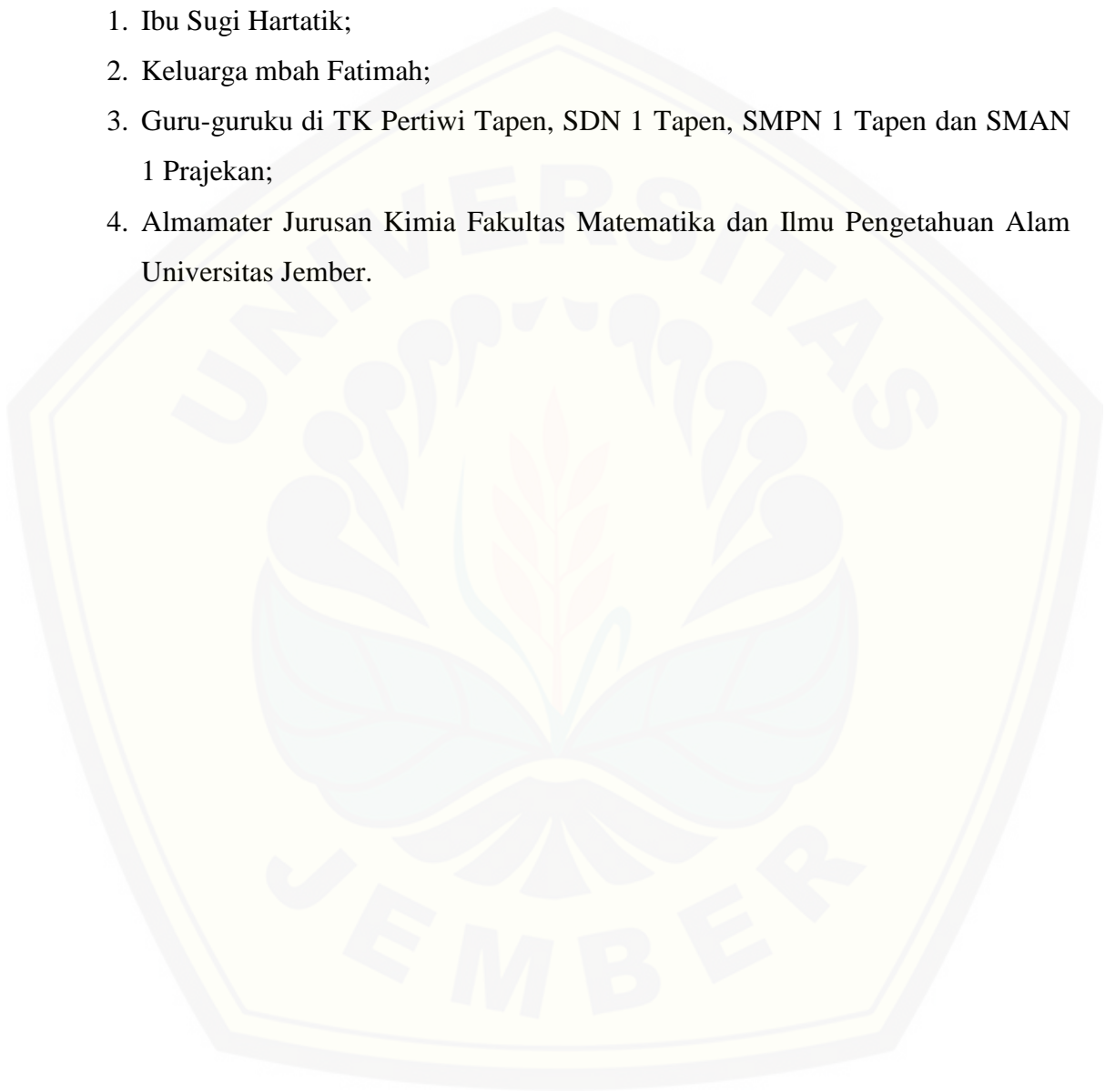
**Marga Romadhona**  
**NIM 111810301025**

**JURUSAN KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS JEMBER  
2016**

## PERSEMBAHAN

Puji syukur kehadirat Allah SWT yang telah meridhoi penyusunan skripsi ini. Skripsi ini saya persembahkan kepada:

1. Ibu Sugi Hartatik;
2. Keluarga mbah Fatimah;
3. Guru-guruku di TK Pertiwi Tapen, SDN 1 Tapen, SMPN 1 Tapen dan SMAN 1 Prajekan;
4. Almamater Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.



### MOTTO

Hai orang-orang beriman, bersabarlah kamu dan kuatkanlah kesabaranmu dan tetaplah bersiap siaga (di perbatasan negerimu) dan bertakwalah kepada Allah supaya kamu beruntung. (terjemahan Q.S Ali Imron (3): 200) <sup>\*)</sup>

Sukses yang sejati terletak pada kemampuan untuk merasakan pikiran bahagia (Erbe Sentanu) <sup>\*\*)</sup>

\*) Departemen Agama Republik Indonesia. 2005. Al Qur'an & Terjemahannya. Bandung: CV Penerbit Jamanut' Ali-Art.

\*\*\*) Sentanu. E dalam Mustofa. A. 2007. Quantum Ikhlas Teknologi Aktivasi Kekuatan Hati. Jakarta : Elex Media Komputindo.

**PERNYATAAN**

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Marga Romadhona

NIM : 111810301025

menyatakan dengan sesungguhnya bahwa skripsi yang berjudul “Modifikasi Selulosa Secara *Molecular Docking* Menggunakan Agen *Crosslink* Asam Dikarboksilat” adalah benar-benar hasil karya sendiri, kecuali dalam pengutipan substansi disebutkan sumbernya, dan belum pernah diajukan instuisi manapun, dan bukan merupakan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya, tanpa ada tekanan dan paksaan dari pihak manapun serta bersedia mendapat sanksi akademik jika ternyata dikemudian hari pernyataan ini tidak benar.

Jember, 29 November 2016

Yang Menyatakan,

Marga Romadhona

NIM 111810301025

**SKRIPSI**

**MODIFIKASI SELULOSA SECARA *MOLECULAR DOCKING*  
MENGUNAKAN AGEN *CROSSLINK* ASAM DIKARBOKSILAT**

Oleh:

Marga Romadhona

NIM 111810301025

Pembimbing

Dosen Pembimbing Utama : Drs. Sudarko PhD.

Dosen Pembimbing Anggota : Yudi Aris Sulistyono S.Si, M.Si

PENGESAHAN

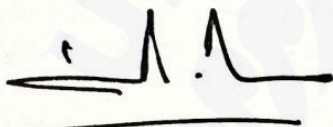
Skripsi berjudul “Modifikasi Selulosa Secara *Molecular Docking* Menggunakan Agen *Crosslink* Asam Dikarboksilat” telah disetujui dan disahkan pada:

Hari, tanggal : **SELASA 22 NOV 2016**

Tempat : Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas  
Jember

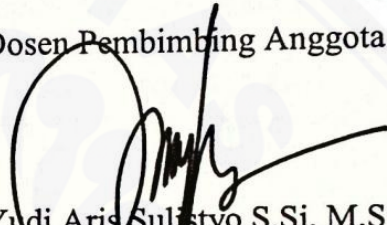
Tim Penguji

Dosen Pembimbing Utama



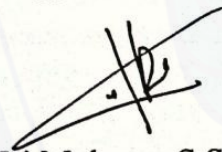
Drs. Sudarko PhD.  
NIP 196903121992031002

Dosen Pembimbing Anggota



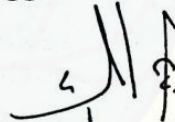
Yudi Aris Sulistyio S.Si, M.Si  
NIP 198809242014041001

Anggota I



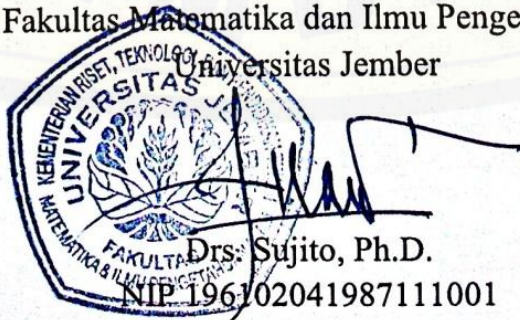
Tri Mulyono S.Si, M.Si  
NIP 196810201998021002

Anggota II



Ika Oktavianawati S.Si, M.Sc  
NIP 198010012003122001

Mengesahkan,  
Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam,  
Universitas Jember



Drs. Sujito, Ph.D.  
NIP 196102041987111001

## RINGKASAN

**Modifikasi Selulosa Secara *Molecular Docking* Menggunakan Agen *Crosslink* Asam Dikarboksilat;** Marga Romadhona, 111810301025; 2016; 37 halaman; Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Selulosa telah dimanfaatkan diberbagai bidang, salah satunya dimanfaatkan sebagai bahan penyerap pada industri popok maupun pembalut. Permasalahan penggunaan selulosa dalam bahan penyerap yakni daya serapnya 20 kali berat aslinya yang dirasa kurang. Penambahan SAP (*Super Absorbent Polymer*) dapat meningkatkan daya serapnya namun berdampak buruk terhadap lingkungan. Cara lain yang dapat dilakukan adalah dengan metode *crosslink* menggunakan agen *crosslink* asam dikarboksilat. Dimana interaksi selulosa dan asam dikarboksilat dapat dilihat menggunakan metode *docking*. Penelitian ini bertujuan menemukan asam dikarboksilat terbaik untuk *crosslink* selulosa. Penentuan asam dikarboksilat terbaik berdasarkan energi Gibbs hasil perhitungan *docking* serta interaksi antara selulosa dan asam dikarboksilat yang menghubungkan selulosa antar rantai.

Penelitian ini menggunakan dua program *docking* yakni AutoDock Vina dan AutoDock 4.2.6. Selulosa (makromolekul) dan asam dikarboksilat (ligan) disiapkan dan diatur parameter *gridbox* menggunakan AutoDock Tools sebelum *docking*. Terdapat 5 ukuran *grid* yang digunakan dalam penelitian ini. Pada AutoDock Vina ligan dan makromolekul disiapkan menggunakan AutoDock Tools sedangkan parameter *grid* pada *file* conf.txt kemudian AutoDock Vina dijalankan. Sedangkan pada AutoDock 4.2.6 parameter *grid* diatur pada AutoDock Tools kemudian dijalankan AutoGrid kemudian AutoDock 4.2.6 dijalankan. Hasil perhitungan kedua program dilihat interaksinya yang sesuai menggunakan PyMol.

Hasil perhitungan AutoDock Vina menghasilkan 9 konformasi sedangkan hasil perhitungan AutoDock 4.2.6 menghasilkan 10 konformasi. Setiap hasil perhitungan dipilih hasil terbaiknya. Ligan terbaik hasil perhitungan kedua *software* adalah asam adipat, dimana energi terendah hasil perhitungan AutoDock Vina sebesar -3,5 kcal/mol dan hasil perhitungan AutoDock 4.2.6 sebesar -2,55 kcal/mol.



## PRAKATA

Puji syukur kehadiran Allah SWT yang telah melimpahkan rahmat serta karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Modifikasi Selulosa Secara *Molecular Docking* Menggunakan Agen *Crosslink* Asam Dikarboksilat”. Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat menyelesaikan pendidikan strata satu (S1) pada Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Penyusunan skripsi ini tidak lepas dari bantuan berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis menyampaikan terimakasih kepada:

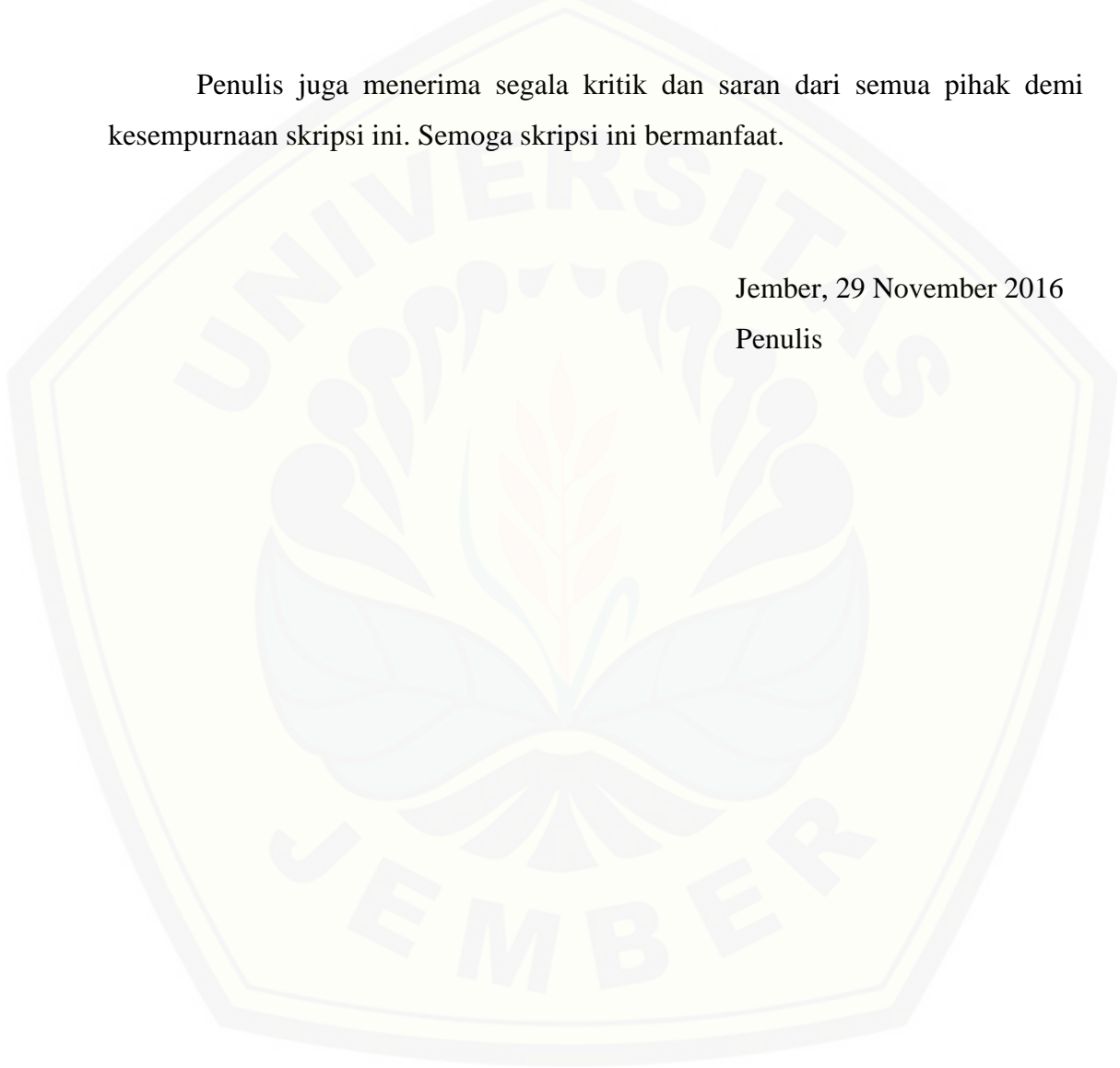
1. Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember,
2. Bapak Dr. Bambang Piluharto, S.Si., M.Si selaku Ketua Jurusan Kimia dan Bapak Ibu Dosen Jurusan Kimia FMIPA Universitas Jember,
3. Bapak Drs. Sudarko PhD selaku Dosen Pembimbing Utama dan Bapak Yudi Aris Sulistyio S.Si, M.Si selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah meluangkan waktu, tenaga dan pikiran dalam penyelesaian skripsi ini,
4. Bapak Tri Mulyono S.Si, M.Si selaku Dosen Penguji I dan Ibu Ika Oktavianawati S.Si, M.Sc selaku Dosen Penguji II yang telah memberikan kritik dan saran dalam penyempurnaan skripsi ini,
5. Bapak Tri Mulyono S.Si, M.Si selaku Dosen Pembimbing Akademik
6. Teman-teman Kimia Angkatan 2011 (SOLVENT) yang sama-sama berjuang dijurusan kimia,
7. Patner penelitian Kimia Komputas: Sarifatun N, Siti Aisyatus dan teman-teman yang telah menemani selama penelitian,
8. HIMAKI FMIPA Universitas Jember yang telah menjadi tempat menimba ilmu selain di kuliah,
9. Sahabat-sahabat: Sisil, Nehe, Zainul, Mirham, Qorry, Putul, Rose, Karina, Nida, Maganda, Mbak Reni, Santy, Sari, Aisyah, Titis, Anis, Aisah, Faiz, Resti, Agus, Fia,
10. Teman-Teman Kimia angkatan 2011,
11. Teman-teman Kost Jl. Bengawan Solo no. 76

12. Semua teknisi di Jurusan Kimia (mas Darma, mas Dulkolim, mbak Sari, mbak Lisa dan mas Yusril), serta admin Jurusan Kimia(Mas Edi)
13. Kakak dan adik angkatan jurusan kimia yang telah memberikan dukungan;
14. Seluruh pihak yang turut membantu, memotivasi dan mendukung selama penulisan skripsi ini yang tidak ddisebutkan satu persatu.

Penulis juga menerima segala kritik dan saran dari semua pihak demi kesempurnaan skripsi ini. Semoga skripsi ini bermanfaat.

Jember, 29 November 2016

Penulis



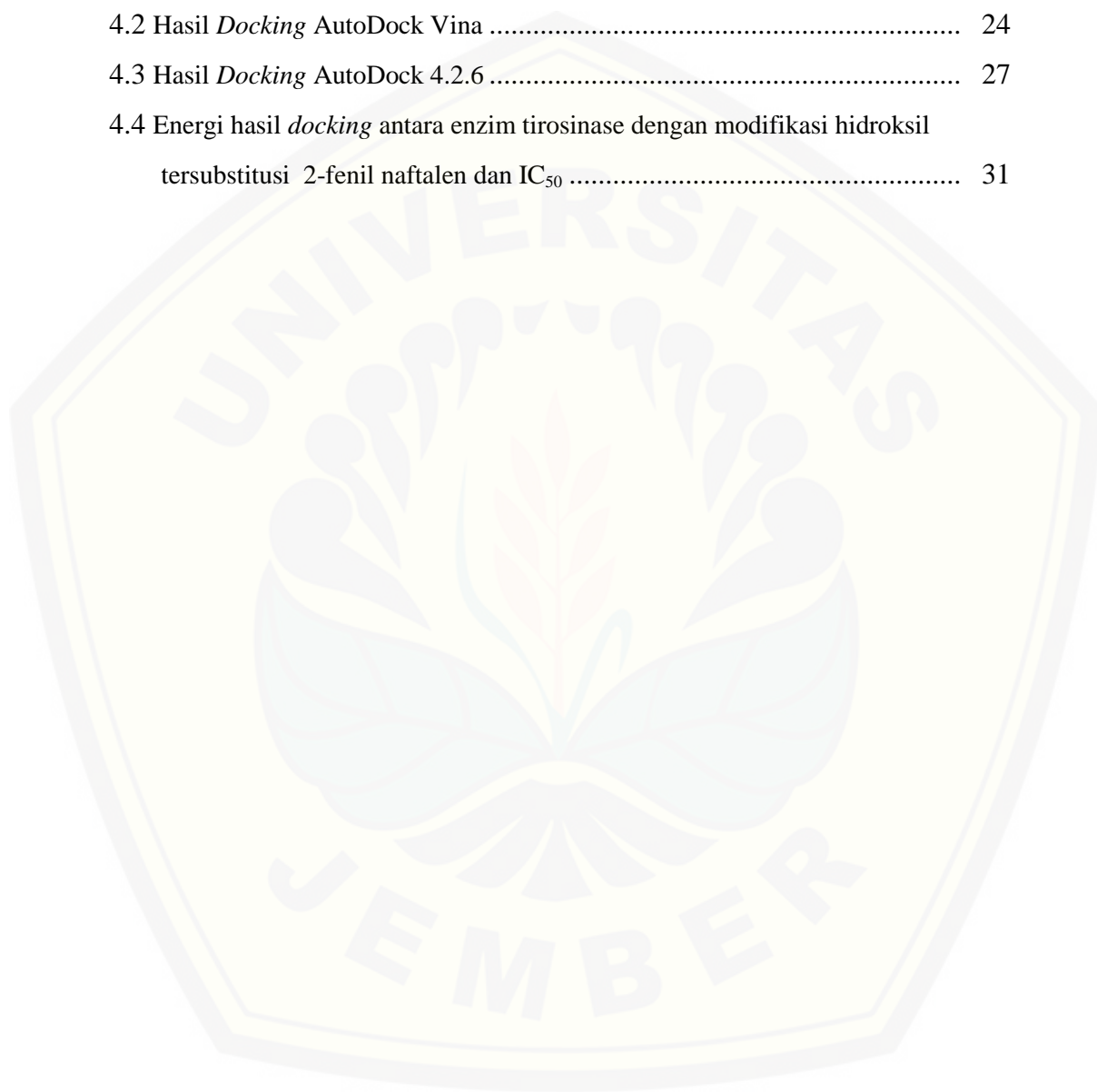
**DAFTAR ISI**

	Halaman
<b>HALAMAN JUDUL</b> .....	i
<b>HALAMAN PERSEMBAHAN</b> .....	ii
<b>HALAMAN MOTTO</b> .....	iii
<b>HALAMAN PERNYATAAN</b> .....	iv
<b>HALAMAN PEMBIMBINGAN</b> .....	v
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b> .....	vi
<b>RINGKASAN</b> .....	vii
<b>PRAKATA</b> .....	viii
<b>DAFTAR ISI</b> .....	x
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	xii
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	xiii
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b> .....	xiv
<b>BAB 1. PENDAHULUAN</b>	
<b>1.1 Latar Belakang</b> .....	1
<b>1.2 Rumusan Masalah</b> .....	3
<b>1.3 Tujuan Penelitian</b> .....	4
<b>1.4 Batasan Masalah</b> .....	4
<b>1.5 Manfaat Penelitian</b> .....	4
<b>BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA</b>	
<b>2.1 Selulosa</b> .....	5
<b>2.2 Pulp Fluf</b> .....	7
<b>2.3 Crosslink (Ikat Silang)</b> .....	7
<b>2.4 Asam Dikarboksilat</b> .....	9
<b>2.5 Molecular Docking</b> .....	10
<b>2.6 Program</b> .....	12
<b>BAB 3. METODOLOGI PENELITIAN</b>	
<b>3.1 Tempat dan Waktu Penelitian</b> .....	15
<b>3.2 Alat dan Bahan</b> .....	15
<b>3.3 Diagram Alir Penelitian</b> .....	16

<b>3.4 Prosedur Penelitian</b>	
3.4.1 Persiapan struktur .....	18
3.4.2 <i>Docking</i> menggunakan AutoDock Vina .....	18
3.4.3 <i>Docking</i> menggunakan AutoDock 4.2.6 .....	20
<b>BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	
<b>A. Analisa Hasil <i>Docking</i></b> .....	21
<b>B. Perbandingan Hasil Docking AutoDock Vina dan         AutoDock 4.2.6</b> .....	27
<b>BAB 5. PENUTUP</b>	
<b>5.1 Kesimpulan</b> .....	33
<b>5.2 Saran</b> .....	33
<b>DAFTAR PUSTAKA</b> .....	34
<b>LAMPIRAN</b> .....	37

**DAFTAR TABEL**

	Halaman
2.1 Struktur agen <i>crosslink</i> .....	9
4.1 Grid AutoDock Vina dan AutoDock 4.2.6 yang digunakan.....	23
4.2 Hasil <i>Docking</i> AutoDock Vina .....	24
4.3 Hasil <i>Docking</i> AutoDock 4.2.6 .....	27
4.4 Energi hasil <i>docking</i> antara enzim tirosinase dengan modifikasi hidroksil tersubstitusi 2-fenil naftalen dan IC <sub>50</sub> .....	31

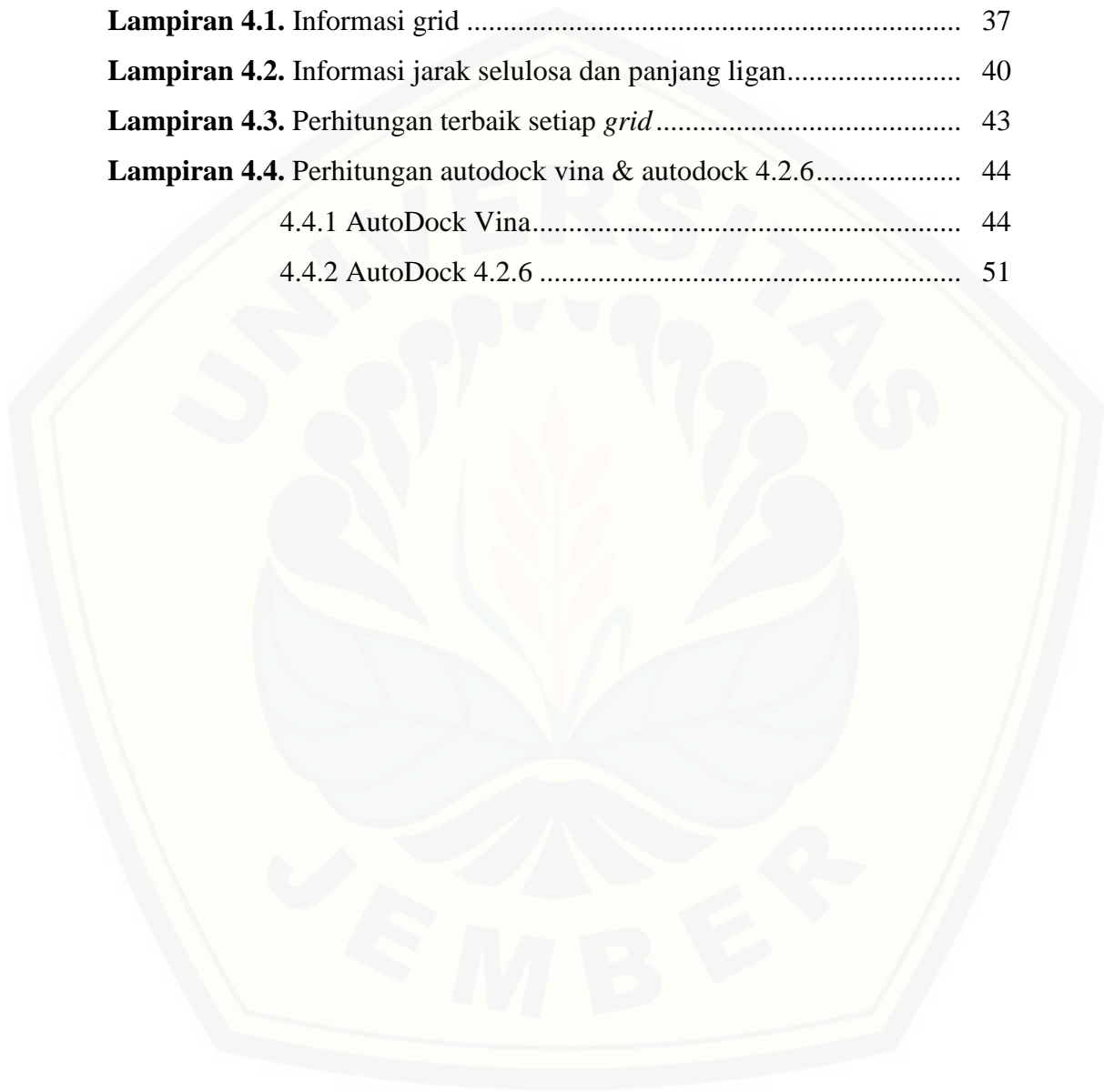


**DAFTAR GAMBAR**

	Halaman
2.1 Struktur selulosa.....	5
2.2 Ilustrasi proses penambatan ligan pada protein (makromolekul) .....	13
4.1 Struktur 3D selulosa.....	22
4.2 Struktur 3D asam dikarboksilat.....	23
4.3 Grafik perbandingan AutoDock Vina dan AutoDock 4.2.6 .....	28
4.4 Visualisasi Hasil <i>Docking</i> selulosa dengan Asam Adipat menggunakan AutoDock Vina dan AutoDock 4.2.6 .....	30
4.5 Pengaruh Energi hasil <i>docking</i> antara enzim tirosinase dengan modifikasi hidroksil tersubstitusi 2-fenil naftalen dan IC <sub>50</sub> .....	32

**DAFTAR LAMPIRAN**

	Halaman
<b>Lampiran 4.1.</b> Informasi grid .....	37
<b>Lampiran 4.2.</b> Informasi jarak selulosa dan panjang ligan.....	40
<b>Lampiran 4.3.</b> Perhitungan terbaik setiap <i>grid</i> .....	43
<b>Lampiran 4.4.</b> Perhitungan autodock vina & autodock 4.2.6.....	44
4.4.1 AutoDock Vina.....	44
4.4.2 AutoDock 4.2.6 .....	51



## BAB 1. PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Selulosa telah diproduksi 1 triliun ton setiap tahunnya. Sumber utama selulosa terdapat dalam tumbuhan terutama kayu dan kapas. Saat ini, selulosa juga dapat dihasilkan dari proses fermentasi bakteri *Acetibacter xylinum* menggunakan media air kelapa sebagai mikronutrien yang disebut selulosa bakteri (Felasih, 2010). Penggunaan selulosa telah banyak dimanfaatkan di berbagai bidang. Selulosa berpotensi besar untuk dikembangkan menjadi produk serta dapat diaplikasikan dalam industri biomaterial, bahan penyerap (pembalut dan popok), obat-obatan, kosmetik dan lain-lain (Soetrisno, 1996 dalam Felasih, 2010). Pada bahan penyerap (pembalut dan popok), selulosa merupakan bahan utama *pulp fluff*.

Selulosa yang digunakan sebagai *pulp fluff* harus memiliki sifat yang spesifik diantaranya berserat panjang, kadar lignin, resin dan gum rendah. Disisi lain, selulosa memiliki sifat yang baik seperti densitas rendah, mudah diuraikan saat kering, memiliki kekuatan saat basah serta memiliki kandungan debunya rendah. Apabila hal tersebut telah dipenuhi, kualitas *pulp fluff* yang dihasilkan akan memiliki daya serap lebih baik (Haroen, 2005). Diketahui bahwa daya serap selulosa dalam keadaan kering dapat menyerap air sampai 20 kali beratnya sendiri (Waluyo *et al.*, 1998). Daya serap ini dirasa kurang untuk penggunaan popok bayi, sehingga diperlukan peningkatan daya serap terhadap air.

Alternatif yang digunakan untuk meningkatkan daya serap selulosa adalah dengan menambahkan bahan aditif. Bahan aditif yang dapat digunakan adalah *Super Absorbent Polymer* (SAP). Penambahan SAP dalam *pulp fluff* dapat meningkatkan daya serap sampai ratusan kali berat awal, namun penambahan zat tersebut membutuhkan biaya produksi yang tinggi (Haroen, 2005). Selain itu, sebagian besar SAP diproduksi dari monomer akrilik seperti asam akrilat, garam akrilat dan akrilamida yang merupakan material berbahaya dan tidak ramah



lingkungan (Mehr dan Kabiri, 2008). Sehingga diperlukan agen modifikator lain yang lebih ramah lingkungan.

Salah satu material yang berpotensi digunakan sebagai modifikator pada selulosa adalah monomer dengan gugus asam karboksilat. Turunan asam karboksilat yang telah dilaporkan dapat digunakan sebagai agen modifikasi selulosa diantaranya asam oksalat (Hamed, *et al.* 2003) dan asam sitrat (Yang dan Xu, 1998). Modifikator dari turunan dari asam dikarboksilat dinilai menguntungkan karena material ini mudah didapatkan dengan harga murah dan tidak berbahaya. Modifikasi selulosa dengan asam dikarboksilat dilakukan dengan metode *crosslink*.

*Crosslinking* atau dikenal dengan sebutan ikatan silang dapat digambarkan sebagai ikatan antara dua rantai polimer yang bergabung satu sama lain melalui suatu cabang (Odion, 1991). Polimer yang mengalami proses ikat silang akan memiliki banyak perubahan terhadap sifatnya. Sifat yang dapat ditingkatkan diantaranya meningkatkan daya serap, dapat bekerja dengan baik pada suhu tinggi, daya larutnya rendah dan untuk memperbaiki sifat mekanik polimer (Muthoharoh, 2012). Penelitian sebelumnya oleh Sallakshmi *et al.*, (2013) tentang *crosslink* kitosan menggunakan asam dikarboksilat telah berhasil dilakukan dan terbukti meningkatkan kekuatan mekanik.

Upaya dalam mempelajari interaksi selulosa dan asam dikarboksilat menggunakan metode *crosslink* dapat digunakan pendekatan secara komputasi. Kimia komputasi dapat meramalkan interaksi yang paling efektif dan efisien. Kimia komputasi mengalami perkembangan yang sangat cepat pada dekade ini. Hal ini dapat dilihat pada perkembangan penemuan obat baru yang semakin lama diharapkan semakin efektif (Istyastono *et al.*, 2003 dalam Wulandari, 2011). Kimia komputasi dapat meramalkan reaksi maupun interaksi yang paling efektif dan efisien, tanpa melalui proses *try and error*.

Selain kimia medisinal, cabang ilmu yang juga terbantu beberapa tahun ini adalah polimer. Sallakshmi *et al.*, (2013) telah melaporkan penggunaan komputasi kimia untuk *crosslink* polimer dengan menggunakan metode *molecular docking*. Tujuan utama penggunaan komputasi kimia dalam polimer untuk mengetahui

kekuatan ikatan sehingga nantinya sifat fisik dapat diperbaiki melalui energi ikatan yang diperoleh dari hasil *crosslink*.

Metode *molecular docking* merupakan metode komputasi untuk memprediksi energi interaksi antara dua molekul. *Molekular docking* merupakan permodelan molekul untuk memprediksi interaksi yang terjadi makromolekul (reseptor) dan molekul kecil (ligan) yang terikat membentuk kompleks secara efisien (Trott dan Olson, 2010). Hasil yang diperoleh dari analisis *docking* ini adalah energi interaksi, dimana interaksi yang paling stabil adalah hasil docking yang memberikan energi terendah. *Software* yang sering digunakan untuk *docking* adalah AutoDock Vina dan AutoDock. Menurut Weingarten (2011), Autodock Vina adalah program *open-source* yang mempunyai kelebihan seperti hasil presisi, akurasi tinggi, dan mudah digunakan. AutoDock memiliki kesamaan kelebihan dengan AutoDock Vina, yang membedakan adalah adanya AutoGrid yang memprekalkulasi grid sebelum menjalankan AutoDock. Selain itu, hasil simulasi *docking* terbukti sesuai dengan hasil laboratorium yang diperoleh berdasarkan eksperimen (Weingarten, 2011).

Berdasarkan latar belakang diatas, maka dalam penelitian ini akan dilakukan penelitian *docking* asam dikarboksilat dengan panjang rantai karbon 5-9 terhadap selulosa serta perbandingannya dengan turunan asam dikarboksilat. Permodelan dari struktur agen *crosslink* dan interaksinya terhadap selulosa dilakukan secara *in silico* (simulasi komputer). Hasil dari *docking* dilihat dari energi terendah dan interaksi yang menghubungkan selulosa antar rantai.

## 1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang diatas, maka rumusan masalah dalam penelitian ini yaitu:

Apa turunan asam dikarboksilat yang memiliki kemampuan terbaik sebagai *crosslinker* selulosa?

### 1.3 Batasan Masalah

Adapun batasan masalah dari penelitian ini sebagai berikut:

- 1.3.1 Struktur 3D dari makromolekul diambil dari *website water structure and science*, <http://www1.lsbu.ac.uk/water/hycelh.html> di bawah lisensi “Creative Commons Attribution UK: England and Wales License dengan format \*.pdb.
- 1.3.2 Agen *crosslinker* yang digunakan diambil dari PubChem kemudian file disimpan dalam bentuk PDB.
- 1.3.3 *Software* yang digunakan dalam penelitian ini adalah Autodock Vina, MGLTOOLS 1.5.6, Pymol, Open Babel GUI, Avogadro.

### 1.4 Tujuan Penelitian

Tujuan dari penelitian ini adalah:

Mengetahui asam dikarboksilat yang memiliki kemampuan terbaik *crosslink* selulosa.

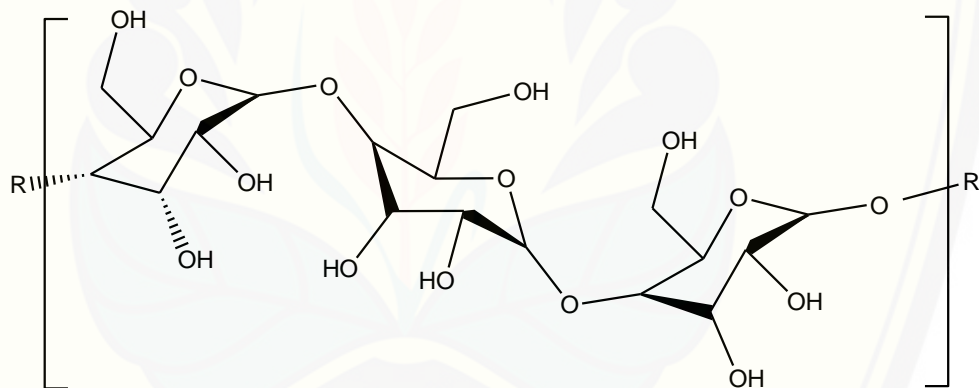
### 1.5 Manfaat Penelitian

Manfaat penelitian ini yaitu dapat memberi informasi mengenai pengaruh *docking* selulosa menggunakan asam dikarboksilat, sehingga diperoleh asam dikarboksilat yang memberikan sifat terbaik dari selulosa melalui hasil *docking*.

## BAB 2. Tinjauan Pustaka

### 2.1 Selulosa

Selulosa merupakan polisakarida yang terdiri atas banyak glukosa yang terikat dengan ikatan  $\beta$ 1,4-glukosida dengan rumus  $(C_6H_{10}O_5)_n$  dimana  $n$  merupakan derajat polimerisasi dari selulosa. Struktur selulosa ini yang membuat selulosa bersifat kristalin dan tidak mudah larut, sehingga tidak mudah didegradasi secara kimia maupun mekanis. Susunan rantai glukosa pada selulosa berupa rantai panjang sejajar, tidak memiliki cabang dan memiliki kecenderungan untuk membentuk ikatan hidrogen antar molekulnya. Semakin panjang rangkaian glukosa pada selulosa, maka selulosa tersebut memiliki serat yang lebih kuat, tahan terhadap pengaruh bahan kimia dan mikroorganisme (Dirga, 2012).



Gambar 2.1 Struktur selulosa (Sumardjo, 2008).

Selulosa merupakan senyawa yang tidak berbau dan berasa, berbentuk padat amorf, berwarna putih. Titik leleh selulosa  $500 - 518^{\circ}C$ . Selulosa tidak larut dalam air dingin atau panas, dan pelarut organik. *Swelling* akan terjadi pada selulosa jika berada pada larutan alkali yang encer, seperti NaOH, larut dalam reagen Schweitzer dan larutan  $ZnCl_2$  (Science Lab, 2013).

Di alam, selulosa berasosiasi dengan polisakarida lain seperti hemiselulosa atau lignin. Bersama hemiselulosa dan lignin, selulosa membentuk kerangka utama pembentuk struktur tumbuhan. Selain itu selulosa dapat disintesis melalui hasil dari metabolisme primer suatu bakteri. Bakteri yang dapat mensintesis selulosa diantaranya termasuk dalam genus *Acetobacter*, *Rhizobium* dan *Sarcina*.

Karakteristik dari selulosa bakteri adalah kemurniannya, dimana selulosa dari tumbuhan masih mengandung hemiselulosa dan lignin yang sulit dihilangkan. Meskipun secara kimia identik dengan selulosa tanaman, tetapi struktur makromolekul selulosa bakteri memiliki karakteristik yang berbeda dengan selulosa tanaman (Felasih, 2010).

Berdasarkan derajat polimerisasinya dan kelarutannya dalam natrium hidroksida, selulosa dibagi menjadi tiga jenis yaitu :

1. Selulosa  $\alpha$  adalah selulosa dengan derajat polimerisasi 600-1500 serta tidak larut dalam 17,5% larutan NaOH. Selulosa  $\alpha$  merupakan selulosa yang paling tinggi tingkat kemurniannya, sehingga banyak digunakan dalam penentuan tingkat kemurnian selulosa.
2. Selulosa  $\beta$  adalah selulosa dengan derajat polimerisasi 15-90 serta larut dalam larutan NaOH 17,5% (basa kuat).
3. Selulosa  $\gamma$  adalah selulosa yang derajat polimerisasinya kurang dari 15 sedangkan kelarutannya juga dapat larut dalam larutan NaOH 17,5% (basa kuat).

Variasi derajat polimerisasi dari selulosa mempunyai pengaruh yang besar dengan reaktivitasnya, dimana gugus hidroksil yang terdapat dalam daerah amorf sangat mudah bereaksi (Sjostrom, 1995).

Selulosa diketahui merupakan polisakarida yang aman sehingga banyak digunakan diberbagai bidang diantaranya bahan dasar pada industri kertas, tekstil, sebagai biomaterial untuk kosmetika dan alat kesehatan karena sifatnya yang unik, seperti mampu mempertahankan air, memiliki kristalin index yang tinggi serta elastis. Selain itu sifat selulosa yang biokompatibel dapat diaplikasikan dalam bidang kesehatan diantaranya dikembangkan sebagai bahan penyerap pada popok dan pembalut serta berpotensi dikembangkan sebagai *scaffold* (Felasih, 2010). Aplikasi lainnya dalam bidang medis adalah sebagai membran tambahan untuk melindungi glukosa oksidasi terimobilisasi dalam biosensor yang digunakan untuk uji kadar gula darah. Sifat selulosa yang elastis, permeabel terhadap udara dan cairan, memiliki kekuatan tarik yang tinggi dapat dimanfaatkan untuk aplikasi tersebut (Bielecki, 2005).

## 2.2 *Pulp fluff*

Pulp adalah bahan selulosa kering yang terbentuk melalui proses pemisahan selulosa dengan berbagai senyawa polimer lainnya seperti lignin. Cara yang sering digunakan untuk memisahkan lignin dan selulosa adalah dengan melarutkan lignin tanpa merusak selulosanya. Pulp fluff sendiri merupakan pulp dari serat selulosa yang dibuat khusus untuk bahan baku penyerapan seperti popok dan pembalut. Sumber pulp fluff diperoleh dari serat selulosa kayu pinus yang tumbuh subur di daerah subtropis. Kayu pinus tersebut diproses agar dapat mengurangi kadar dari lignin, resin ekstraktif dan gum pada pulp. Pulp fluff digunakan sebagai bahan pengisis pada popok dibentuk menjadi lembaran dalam keadaan kering. Lembaran pulp fluff memiliki berat yang ringan dan ruah (*bulky*) menyerupai kapas supaya cairan dapat terjebak dalam rongga selulosa (Haroen, 2005).

## 2.3 *Crosslinking (Ikat Silang)*

Crosslinking atau ikat silang dapat digambarkan sebagai ikatan antara dua rantai polimer yang bergabung satu sama lain melalui suatu cabang (Odion, 1991). Secara umum ikat silang dibedakan menjadi 2 yaitu, ikatan silang secara kimia (*chemical crosslinking*) dan ikatan silang secara fisika (*physical crosslinking*). Ikatan silang kimia dapat terjadi melalui ikatan kovalen maupun ion. Ikatan silang pada polimer dapat mempengaruhi derajat pembengkan (*swelling*). Ketika suatu polimer ikat silang dilarutkan polimer tersebut akan mengembang, pada saat molekul-molekul pelarut menembus jaringannya. Tingkat pembengkakan (*swelling*) ini bergantung pada tingkat pengikat silangan dan afinitas antara pelarut dan polimer. Sedangkan ikatan silang fisika terdiri dari ikatan-ikatan silang yang labil secara termal, dimana ikatan ini akan putus ketika dipanaskan dan mengikat kembali setelah didinginkan (Stevens, 2007). Pengembangan ikat silang fisika ini dilakukan mengingat banyaknya kekurangan

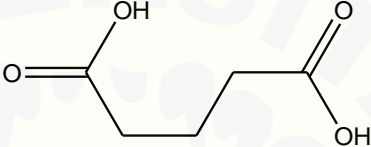
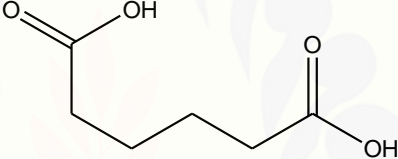


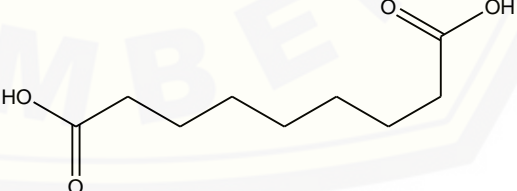
yang dimiliki polimer yang mengalami ikat silang kimia. Polimer yang diikat melalui ikatan kovalen, polimer tersebut tidak dapat dilarutkan ataupun dilebur, sehingga polimer tersebut tidak dapat didaur ulang sehingga dilakukan peninjauan lebih dalam mengenai cara-cara untuk mengatasi masalah tersebut (Stevens, 2007).

Polimer yang mengalami proses ikat silang akan memiliki banyak perubahan terhadap sifatnya. Adapun sifat polimer yang dapat ditingkatkan dengan adanya proses ikat silang yakni meningkatkan daya tahan terhadap kemungkinan terjadinya goresan, dapat bekerja dengan baik pada suhu tinggi, daya larutnya rendah dan untuk memperbaiki sifat mekanik polimer (Muthoharoh, 2012). Kekuatan ikat silang polimer dapat ditentukan melalui rapat ikat silang. Rapat ikat silang adalah jumlah unit-unit monomer yang terikat silang per rantai utama. Semakin tinggi rapat silang, maka polimer yang mengalami ikat silang akan semakin keras. Rapat silang yang semakin tinggi akan menyebabkan perapuhan. Metode ikat silang ini sering dilakukan untuk meningkatkan suhu transisi gelas (Stevens, 2007).

Crosslinking polimer terjadi ketika ikatan valensi primer terbentuk antara molekul-molekul rantai polimer yang terpisah. Selain ikatan dimana monomer membentuk rantai polimer, ikatan polimer yang lain terbentuk diantara polimer tetangganya. Ikatan ini dapat terbentuk secara langsung diantara rantai tetangganya, atau dua rantai dapat terikat menjadi rantai yang lain. Walaupun tidak sekuat ikatan pada rantai, crosslink mempunyai peran yang sangat penting pada polimer. Ketika polimer diregangkan, ikatan crosslink mencegah rantai untuk berpisah. Ikatan ini memperkuat, namun ketika tegangan dihilangkan maka struktur akan kembali ke bentuk semula dan objek pun demikian (Umam *et al.*, 2008 dalam Rahayu, 2009).

## 2.4 Asam Dikarboksilat

Asam dikarboksilat merupakan senyawa organik yang mempunyai dua gugus karboksilat (COOH) dalam strukturnya. Penelitian ini menggunakan senyawa organik rantai lurus dan kedua gugus karboksilat pada ujungnya. Senyawa yang digunakan antara lain :

No	Nama IUPAC	Nama Umum	Struktur
1.	Asam 1,5 pentadioat	Asam glutarat	
2.	Asam 1,6 heksadioat	Asam adipat	
3.	Asam 1,7 heptadioat	Asam pimelat	
4.	Asam 1,8 oktadioat	Asam suberat	
5.	Asam 1,9 nonadioat	Asam azeleat	

Tabel 2.1 Struktur Agen Crosslink

Nama umum asam dikarboksilat lebih sering digunakan karena lebih sederhana daripada nama IUPAC. Untuk menunjukkan adanya dua buah gugus karboksilat (COOH), kata “asam oat” pada asam karboksilat digantikan dengan



“asam dinoat”. Asam dikarboksilat dengan lima atau kurang dari lima mempunyai kelarutan dalam air, yang menunjukkan sifat sifat dan kemampuan ikatan hidrogen. Semakin panjang rantai atom karbon pada asam dikarboksilat ini akan membuat penurunan kelarutan dalam air. Keistimewaan yang menonjolkan asam dikarboksilat adalah adanya dua gugus COOH, dimana hal tersebut menunjukkan dua atom hidrogen asam sehingga asam dikarboksilat mempunyai 2 pKa, yakni pKa<sub>1</sub> dan pKa<sub>2</sub> (Smith, 2010).

## 2.5 *Molecular Docking*

*Molecular Docking* adalah teknik komputasi untuk memprediksi energi interaksi antar dua molekul. Metode *Docking* merupakan permodelan molekul untuk memprediksi interaksi yang terjadi makromolekul (reseptor) dan molekul kecil (ligan) yang terikat membentuk kompleks secara efisien (Trott dan Olson, 2010). *Molecular docking* merupakan suatu metode penggabungan makromolekul (reseptor) dan molekul kecil (ligan) yang dapat menghasilkan orientasi relatif dari kedua molekul tersebut, dimana derajat kebebasannya sesuai.

Metode *docking* dilakukan dengan menempatkan ligan secara sistematis pada sisi aktif makromolekul (Morris *et al.*, 2001). *Docking* mampu memprediksi kompleks ligan-protein dalam waktu yang cepat dan dengan biaya yang relatif murah. Sehingga molekular docking dapat mereduksi biaya pengembangan, meningkatkan efisiensi energi.

Pada dasarnya, tujuan *docking* molekuler adalah untuk memberikan prediksi struktur kompleks ligan-reseptor menggunakan metode perhitungan. Step dasar pada docking molekular yaitu:

1. Prediksi konformasi ligan yang sesuai posisi dan orientasinya pada sisi-sisi target
2. Pemberian peringkat melalui fungsi *scoring* (Guedes *et al.*, 2013).

Ada dua masalah umum yang dijumpai dalam docking molekul yaitu, pemilihan fungsi energi yang digunakan selama proses docking dan pemilihan algoritma yang tepat (Kitchen *et al.*, 2004 dalam Pinilih, 2011). Untuk

mempercepat proses docking, afinitas potensial dari makromolekul dihitung dengan grid tertentu. Teknik simulasi ini juga dapat digunakan untuk mengoptimasi jarak dari struktur makromolekul. Perhitungan energi pada docking didasarkan pada perhitungan energi bebas Gibbs.

### 2.5.1 Energi Bebas

Konsep energi bebas merupakan konsep pusat dari termodinamika. Energi bebas dapat ditunjukkan sebagai probabilitas pengukuran yang menjelaskan energi rata-rata dari molekul dalam jumlah banyak. Dalam ilmu kimia, biasa disebut sebagai energi bebas Gibbs dan energi bebas Helmholtz. Energi bebas Gibbs menggambarkan reaksi pada temperatur dan tekanan konstan sedangkan energi bebas Helmholtz menggambarkan reaksi yang berlangsung pada kondisi tekanan dan volume konstan. Reaksi kimia dapat berjalan spontan dengan adanya penurunan fungsi Gibbs. Definisi paling umum dari energi bebas adalah :

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Dimana H adalah entalpi, T adalah temperatur dan S adalah entropi dari sistem (Atkins dan Paula, 2006).

Beberapa komponen pada entalpi dan entropi sangat berpengaruh pada hasil energi bebas gibbs dalam proses *docking*. Komponen entalpi antara lain interaksi antara ligan dan protein, interaksi antara ligan dan pelarut, interaksi antara protein dan pelarut, serta perubahan konformasi. Sedangkan komponen yang berpengaruh dari entropi antara lain entropi rotasional dan translasional, entropi konformasional (perubahan entropi sebelum dan sesudah *rotatable bond* menemukan konformasi yang stabil), *hidrofobicity* (penolakan terhadap air), dan entropi vibrasional (Laitinen, 2016). Persamaan perhitungan yang digunakan dalam Autodock yaitu:

$$\Delta G = (V_{bound}^{L-L} - V_{unbound}^{L-L}) + (V_{bound}^{P-P} - V_{unbound}^{P-P}) + (V_{bound}^{P-L} - V_{unbound}^{P-L} + \Delta S_{conf})$$

$$(\quad 1 \quad) + (\quad 2 \quad) + (\quad 3 \quad)$$

dimana P adalah protein (makromolekul) dan L adalah ligan. Bagian  $V_{bound}^{L-L} - V_{unbound}^{L-L}$  adalah energi intramolekul ligan untuk berikatan (ikatan fisik) atau tidak berikatan, sedangkan  $V_{bound}^{P-P} - V_{unbound}^{P-P}$  adalah energi intramolekul protein untuk

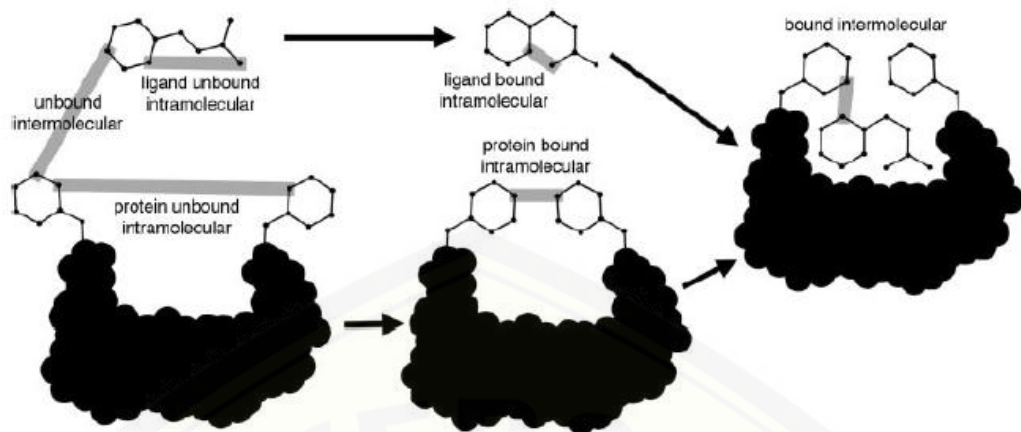
berikatan atau tidak berikatan. Bagian lainnya yakni  $V_{bound}^{P-L} - V_{unbound}^{P-L} + \Delta S_{conf}$  merupakan perubahan energi intermolekular antara keadaan terikat dan tidak terikat. Apabila struktur makromolekul *rigid*, maka perubahan energi intramolekular adalah nol, karena tidak ada perubahan antara berikatan dan tidak berikatan (Huey, *et.al.*, 2007).  $V_{bound}^{L-L} - V_{unbound}^{L-L}$  dianggap nol karena asumsi yang digunakan adalah tidak ada perubahan energi intramolekular antara ligan yang berikatan dan tidak berikatan (Morris, 2012).

## 2.6 Program

### 2.5.1 AutoDock dan AutoDock Vina

Salah satu *software docking* adalah AutoDock. AutoDock merupakan software yang digunakan untuk memprediksi interaksi ligan dengan makromolekul target. AutoDock biasa digunakan untuk melihat interaksi antara obat-obatan dengan senyawa bioaktif seperti enzim, antibodi, DNA dan RNA (Morris et al., 2010). Terdapat dua generasi dari AutoDock yaitu AutoDock 4 tersedia gratis di bawah GNU *General Public License* dan AutoDock Vina tersedia di bawah lisensi Apache, memungkinkan penggunaan komersial dan non-komersial. AutoDock Vina adalah sebuah software yang juga digunakan untuk molekular docking. Output yang dihasilkan berupa energi dari beberapa pose terbaik ligan, dimana pose terbaik menunjukkan afinitas ikatan yang paling rendah (Trott dan Olson, 2009). Hasil simulasi docking terbukti mempunyai presisi dan akurasi yang tinggi, dimana hasil tersebut sesuai dengan hasil lab yang diperoleh berdasarkan eksperimen.

Perhitungan energi pada AutoDock 4.2.6 dapat dilihat pada Gambar 2.2. Perhitungan energi dievaluasi dalam dua tahap. Ligan dan protein (makromolekul) berawal dari konformasi sebelum penambatan (*unbound conformation*). Tahap kedua mengevaluasi energi intermolekuler dari penambatan ligan dan protein (makromolekul) pada konformasi setelah penambatan yang terikat secara fisik (*bound conformation*).



Gambar 2.2. Ilustrasi proses penambatan ligan pada protein (makromolekul)

Terdapat 4 potensi jenis interaksi yang berkontribusi pada program *Autodock*, yaitu energi ikatan van der Waals, ikatan hidrogen, ikatan elektrostatik, dan desolvasi. Energi van der Waals adalah energi gaya tarik antar dua atom karbon.. Energi elektrostatik merupakan energi yang ditimbulkan akibat muatan berlawanan pada masing-masing molekul (Morris *et al.*, 2014). Energi desolvasi, yaitu energi ikatan antara makromolekul dan ligan dalam larutan (Morris *et al.*, 2001).

### 2.5.2 PyMol

PyMol merupakan software yang berguna untuk visualisasi grafis molekuler. Warren L. DeLano mengembangkan *software* PyMol ini menggunakan bahasa pemrograman C dan Python. Program visualisasi ini merupakan program multiplatform yang dapat berjalan pada beberapa sistem operasi. Sistem operasi yang dapat menjalankan *software* ini diantaranya Unix/Linux, Windows, ataupun Mac-OS. PyMol mudah digunakan karena tampilannya berbasis grafis atau GUI (Graphical User Interface). Sebagai *software* visualisasi grafis molekuler, pymol dapat digunakan untuk beberapa hal antara lain untuk membaca basis data protein PDB (Protein Data Bank), menampilkan struktur 3D makromolekul dengan berbagai representasi bentuk, visualisasi hasil kristalografi, seleksi dan edit bagian tertentu pada molekul, menampilkan proses trajektori hasil simulasi molekuler dinamik, dan analisis

molekular lainnya seperti visualisasi warna, menghitung jumlah ikatan hidrogen, menampilkan sekuens protein dan kalkulasi struktur sekunder (Hidayat, 2010).



### BAB 3. METODOLOGI PENELITIAN

#### 3.1 Tempat dan Waktu Penelitian

Penelitian ini akan dilakukan di UPT-TI Universitas Jember pada bulan Oktober 2015 sampai selesai.

#### 3.2 Alat Penelitian

Komputer dengan spesifikasi:

- CPU : AMD C-60 APU with Radeon(tm) HD Graphics (2 CPUs), ~1.0GHz
- Memori : 2 GB
- Sistem Operasi : Linux Ubuntu

Dilengkapi dengan aplikasi :

- AutoDock Vina
- MGL Tools 1.5.6
- PyMol
- Avogadro
- Open Babel GUI

Komputer dengan spesifikasi:

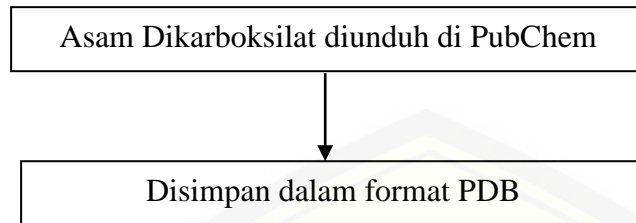
- CPU : Up to 2x Quad or Six-Core Intel Xeon 5500 or 5600 Series
- Memori : Up to 288GB (18 DIMM slots): 1GB/2GB/4GB/8GB/16GB DDR3 up to 1333MHz

Dilengkapi dengan aplikasi :

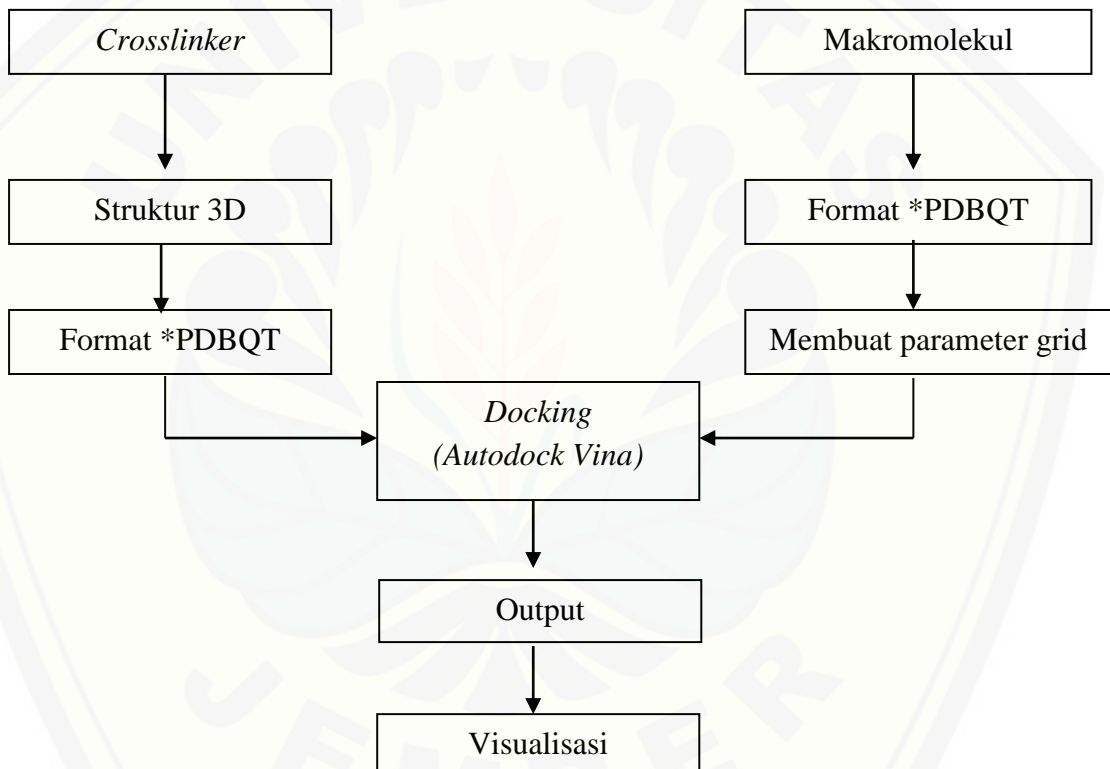
- AutoDock Vina
- AutoDock 4.2.6
- MGL Tools 1.5.6
- PyMol

### 3.3 Diagram Alir Penelitian

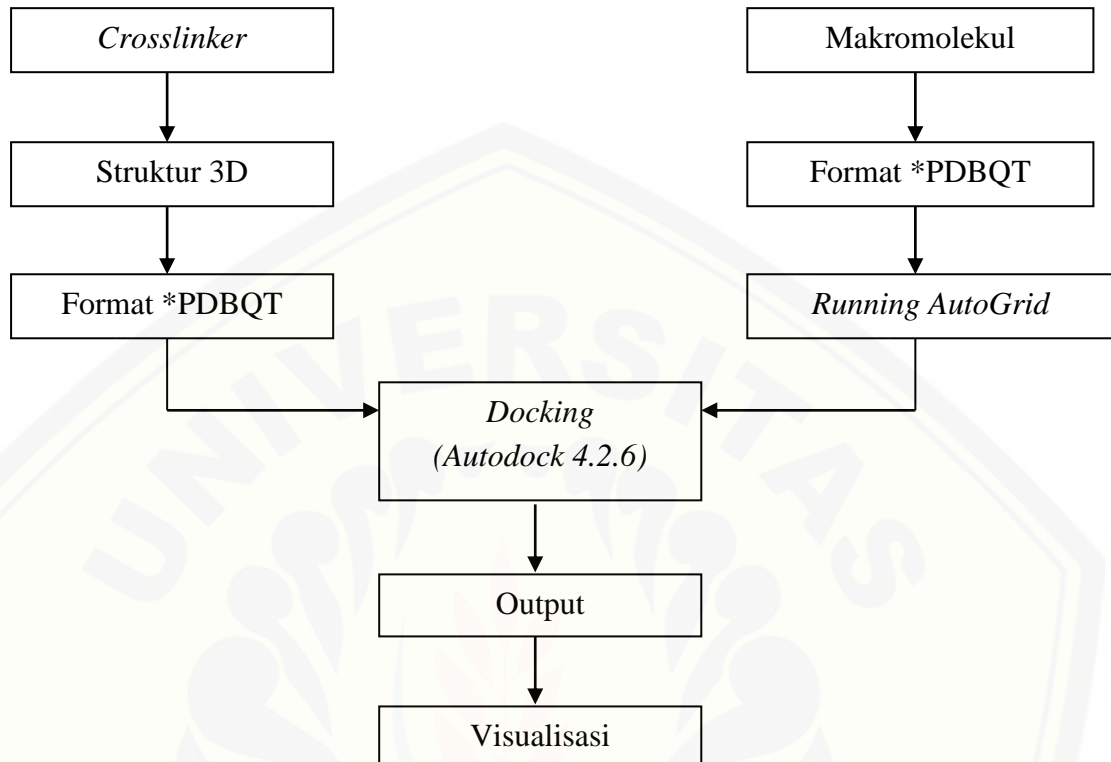
#### 3.3.1 Preparasi Struktur Asam Dikarboksilat



#### 3.3.2 Docking AutoDock Vina



### 3.3.3 Docking Menggunakan AutoDock 2.4.6





### 3.4 Prosedur Penelitian

Prosedur penelitian yang akan dilakukan adalah *Docking*, dengan tahapan sebagai berikut:

#### 3.4.1 Persiapan Struktur

##### a. Persiapan Struktur *Crosslinker Dicarboxylic acid (DCA)*

Struktur asam glutarat, asam adipat, asam pimelat, asam suberat, asam azeleat, asam sebasat didownload dan disimpan dalam bentuk PDB. Tahap-tahap pengeditan molekul Asam Dikarboksilat (format \*.pdb) menjadi \*.pdbqt dengan AutoDockTools adalah sebagai berikut:

1. Struktur Asam Dikarboksilat dengan format \*.pdb, diimpor ke AutoDockTools.
2. Menyimpan file dalam format \*.pdbqt.

##### b. Persiapan Selulosa

Struktur selulosa dalam format \*.pdb diambil dari situs (Cellulose (Jmol)) <http://www1.lsbu.ac.uk/water/hycelh.html>. Selanjutnya tahap pengeditan selulosa (format \*.pdb) menjadi \*.pdbqt dengan AutoDockTools adalah sebagai berikut:

1. Struktur selulosa dengan format \*.pdb, diimpor ke AutoDockTools.
2. Ditambahkan hidrogen polar pada struktur selulosa
3. Menyimpan file dalam format \*.pdbqt.

#### 3.4.2 *Docking* Menggunakan *AutoDock Vina*

##### a. Menentukan *Grid Box*

Penentuan *grid box* bertujuan menentukan gugus yang reaktif dari makromolekul untuk berinteraksi dengan *crosslinker*. *Grid box* merupakan lokasi dimana *crosslinker* akan berinteraksi dengan target makromolekul dan digambarkan dalam bentuk kotak 3D. *Gridbox* terdiri dari *size* dan *center gridbox*, dimana *size* merupakan ukuran dari *gridbox*, sedangkan *center* merupakan posisi dari *gridbox*.

b. Persiapan *File* Parameter

Beberapa parameter yang harus disiapkan sebelum menjalankan *AutoDock Vina* antara lain:

- *File* selulosa dengan format \*.pdbqt
- Asam Dikarboksilat dengan format \*.pdbqt
- *File conf.txt*

c. Menjalankan *AutoDock Vina*

Proses *docking AutoDock Vina* dijalankan dengan *Terminal* yang tersedia pada *menu bar di linux*. Selain itu, *file* selulosa dan Asam Dikarboksilat disimpan dalam folder yang sama. Sebelum proses *docking*, terlebih dahulu dibuat *file conf.txt* menggunakan *notepad*. *File conf.txt* digunakan untuk konfigurasi *docking*, di dalamnya berisi informasi mengenai makromolekul (selulosa), *crosslinker* (Asam Dikarboksilat), serta parameter *gridbox* yang dipakai untuk proses *docking*.

Perintah yang dilakukan dalam *Terminal* adalah

```
cd Documents/penelitian  
./vina -config conf.txt -log log.txt
```

d. Evaluasi Hasil *Docking*

Evaluasi selulosa dan Asam Dikarboksilat hasil *docking* dilakukan dengan memilih salah satu konformasi Asam Dikarboksilat dengan nilai *binding affinity* (kkal/mol) yang terbaik atau yang memiliki nilai terkecil (*best mode*). Hasil kalkulasi *binding affinity* dapat dilihat dalam *log file* yang dapat dibuka menggunakan *notepad*.

e. Visualisasi

Visualisasi hasil *docking* dilakukan menggunakan program *PyMol*. Program ini dapat menunjukkan konformasi masing-masing Asam Dikarboksilat ketika berinteraksi dengan selulosa.

### 3.4.3 Perhitungan AutoDock 4.2.6

#### a. *Running AutoGrid*

Pemetaan Grid dilakukan pada makromolekul. Tahap-tahap persiapan

*Running AutoGrid* adalah sebagai berikut:

1. Membuka *file* selulosa dalam format \*.pdbqt
2. Memilih Grid → Edit GPF
3. Menentukan parameter grid
4. Menyimpan *file* dalam format \*.gpf
5. Menjalankan autogrid dengan perintah *Run* → *Run AutoGrid*

Dimana '-p macro.gpf' adalah parameter *grid* yang telah ditentukan, dan '-l macro.gpf' adalah *file output* selama perhitungan *grid*.

#### b. *Running AutoDock 4.2.6*

Perlu disiapkan beberapa parameter untuk menjalankan *AutoDock 4.2.6*. tahap persiapan parameter adalah sebagai berikut:

1. Menentukan makromolekul dan ligan
2. Menentukan parameter algoritma pencarian
3. Menyimpan parameter *Genetik Algorithm-Local Search* (GA-LS) dengan format \*.dpf
4. Menjalankan perintah *AutoDock* dengan perintah:  
/autodock4 -p filename.dpf -l filename.dlg → Launch

#### c. Visualisasi

Visualisasi hasil *docking* dilakukan menggunakan program *PyMol*. Program ini dapat menunjukkan konformasi masing-masing *TCA* ketika berinteraksi dengan selulosa.

## BAB 5. PENUTUP

### 5.1 Kesimpulan

*Docking* selulosa dan kelima asam dikarboksilat menghasilkan tren yang mirip antara AutoDock Vina dan AutoDock 4.2.6. Tren yang dihasilkan berturut-turut dari yang terendah berdasarkan AutoDock Vina adalah asam adipat, asam glutarat, asam pimelat, asam suberat dan asam azeleat; sedangkan berdasarkan AutoDock 4.2.6 berturut-turut asam adipat, asam pimelat, asam glutarat, asam suberat dan asam azeleat. Asam dikarboksilat yang paling baik berdasarkan penelitian secara *molecular docking* menggunakan AutoDock Vina dan AutoDock 4.2.6 adalah Asam adipat.

### 5.2 Saran

Proses *docking* merupakan proses simulasi yang hanya memiliki fungsi prediksi, sehingga diperlukan penelitian secara eksperimen.

## DAFTAR PUSTAKA

- Atkins, P. & Paula J.D. 2006. *Atkins' Physical Chemistry 8th Edition*. Oxford: Oxford University Press.
- Bielecki S, Alina K, Marianna T, Halina K. *Bacterial Cellulose* (www.wileyinterscience.com). 2005. Diakses 3 Mei 2015.
- Dahlana, M., Dahlianty, A.,Devi, S. 2014. Pemanfaatan Selulosa Popok Bayi sebagai Substrat Untuk Produksi Enzim Selulase oleh Isolat Bakteri S-16 dan S-22 Strain Lokal Riau. *JOM FMIPA*. Vol. 1
- Dirga HP, Rizky. 2012. *Ekstraksi Serat Selulosa dari Tanaman Enceng Gondok (Eichornia crassipes) dengan Variasi Pelarut*. Skripsi. Jakarta: Universitas Indonesia.
- Felasih, Eli. 2010. *Pemanfaatan Selulosa Bakteri – Polivinil Alkohol (PVA) Hasil Iradiasi (Hidrogel) Sebagai Matriks Topeng Masker Wajah*. Skripsi. Jakarta : UIN Syarif Hidayatullah.
- Guedes., Isabella., Magalhaes., Laurent., Dardenne. 2013. “*Receptor-ligan Molecular Docking*”. *Journal of Biophysics*.
- Hamed, Othman dan Jesup. 2003 European Patent Specification: *Chemically Cross-Linked Cellulosic Fiber and Method of Making Same*.Paris: Jouve.
- Haroen, WK. 2005. *Penambahan SAP pada Pembuatan Pulp Fluff non Kayu untk Meningkatkan Daya Serap*. *BS Vol. 40: 1-9*.
- Hidayat, Andri N. 2010. *Program Visualisasi Molekuler : PyMOL* [Serial Online]. <http://www.bioinformatika.org/artikel/programvisualisasimolekulerpymol> [15 Juni 2015].
- Huey, R., Morris, G.M., dan Forli, S. 2011. *Using AutoDock 4 and Vina with AutoDockTools*. USA: *The Scripps Research Institute Molecular Graphics Laboratory*.
- Istyastono, E.P., Sudiby, M., Harno, D. P., dan Iqmal, T. 2003. Quantitative Structure-Activity Relationship Analysis of Curcumin and Its Derivates as

GST Inhibitors Based on Computational Chemistry Calculation. *Journal of Chemistry*. Vol. 3(3), 79-86.

Laitinen, Tuomo. 2016. *Molecular Docking* [serial online]. <https://www.csc.fi/documents/200270/259203/Docking+slides/a2bb77b8-8aa0-4b63-9659-5b81885c676e> [9 Agustus 2016].

Morris, Goodsell, Pique, Lindstrom, Huey, Forli, Hart, Halliday, Belew dan Olson. 2010. *User's Guide AutoDock (Auto Docking of Flexible Ligands to Receptors), Version 4.2.5*. USA: The Scripps Research Institute.

Odian, George. 2004. *Principles of Polymerization, Fourth Edition*. New York : Wiley-Interscience/

Pinilih, Intyastiwi. 2011. Studi QM/MM-MD tentang Pengaruh Mira-3 Terhadap Struktur Mutan Onkogen Y220C pada p53. *Skripsi*. Surakarta: FMIPA Universitas Sebelas Maret.

Prasetia, Tirtana. 2011. Simulasi Dinamika Molekul Kompleks *Histone Deacetylase* (HDAC) Kelas II *Homo Sapiens* dengan *Suberoylanilide Hydroxamic Acid* (SAHA) dan Turunannya Sebagai Inhibitor Kanker Serviks. *Skripsi*. Depok. Universitas Jakarta.

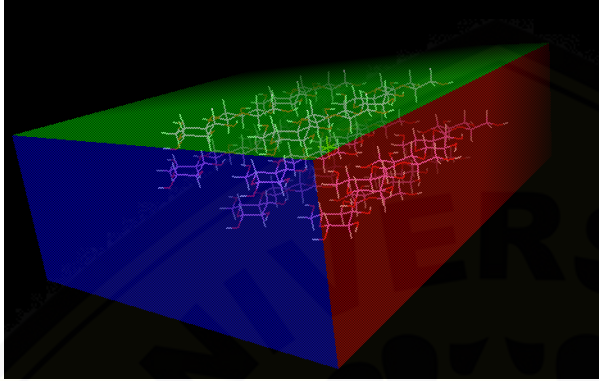
Rahayu, Yennis Tri. 2009. Pengaruh Modifikasi Film Glukomannan dari Umbi IlesIles (*Amorphophallus Oncophyllus*) Menggunakan Asam Sitrat Terhadap Karakteristik Sifat Fisik dan Kimia. *Skripsi*. Jember: FMIPA Universitas Jember.

Sallakshmi, G., Mitra., Chatterjee., Gnanamani, A. 2013. "Engineering Chitosan Using  $\alpha$ ,  $\beta$ -Dicarboxylic Acids—An Approach to Improve the Mechanical Strength and Thermal Stability". *Journal of Biomaterials and Nanobiotechnology*, 4, 151-164.

Samira, 2009. Perancangan Peptida Siklis Sebagai Inhibitor Potensial untuk Enzim NS3-NS2B Protease Virus *Dengue* Secara *In Silico* Melalui *Molecular Docking*. *Skripsi*. Depok: Universitas Jakarta.

Schneider, G., Baringhaus, K. P., Kubinyi, H. 2008. *Molecular Design : Concepts and Applications*. USA: Wiley-VCH.

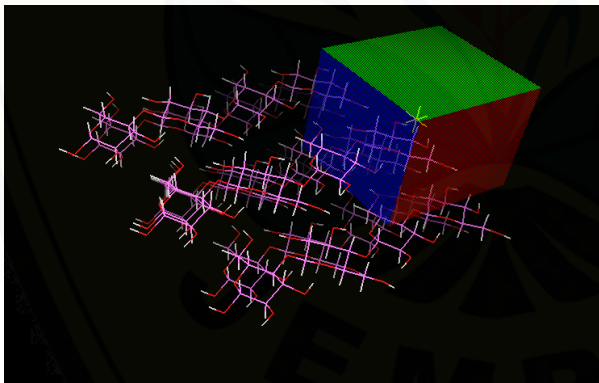
- Science Lab. 2013. Material Safety Data Sheet Cellulose. ScienceLab.com [serial on line]. [www.sciencelab.com/msds.php?msdsId=9927490](http://www.sciencelab.com/msds.php?msdsId=9927490) [17 Juni 2015].
- Smith, Michael B. 2010. *Organic Chemistry an Acid-Base Approach*. USA: CRC Press.
- Soedirjo, Soetrisno T., "Selulosa Bakteri sebagai Alternatif Sumber Serat", *Berita Selulosa* vol.37 No.3, 1996, hal 20-25
- Surdia, T dan Shinroku, S. 1995. *Pengetahuan Bahan Teknik*. Jakarta : Pradnya Paramita.
- Stevens, Malcolm P. 1989. *Kimia Polimer*. Terjemahan oleh Lis Sopyan. 2007. Jakarta : Pradnya Paramita.
- Tanguenyongwatana, Prasan dan Jongkon, N. 2016. Molecular Docking Study of Tyrosinase Inhibitors using ArgusLab 4.0.1: A Comparative Study. *Thai Journal of Pharmaceutical Science*. Vol. **40**(1): 21-25.
- Troot, O. dan Olso, A.J. 2010. AutoDock Vina: Improving the Speed and Accuracy of Docking with a New Scoring Function, Efficient Optimization, and Multithreading. *J. Comput Chem*, 31: 455 – 461.
- Waluyo, Sugeng., Widadi, Agus., Burhanansyah. "Studi Awal Pembuatan Spons Selulosa", *Prosiding Simposium Nasional Polimer II*, 1998, hal 110-116
- Weingarten, N. 2011. Autodock Vina. <https://appdb.ebi.eu/store/software/autodock.vina> [10 Juni 2015].
- Widsten, Dooley, Parr, Capricho, dan Suckling. 2013. Citric Acid Crosslinking of Paper Products for Improved High-Humidity Performance. *Carbohydrate Polymers*. Vol.**101**: 998–1004.
- Wulandari, R. 2011. *Modifikasi Tipranavir untuk Meningkatkan Kinerja Inhibisi pada Enzim HIV-1 Protease Secara In Silico*. Skripsi. Jember: Universitas Jember
- Yang, C.Q., dan Xu, Y. 1998. "Paper Wet Performance and Ester Crosslinking of Wood Pulp Cellulose by Polycarboxylic Acids". *Journal of Applied Polymer Science*. 67, 649–658.
- Zohuriaan-Mehr, M. J. and Kabiri, K. 2008. Superabsorbent Polymer Material: A Review. *Polym J*. 6, 451-477.

**LAMPIRAN****Lampiran 4.1 Informasi Grid***Grid 1*

## Keterangan

*Size* : x, y, z = 70, 30, 104

*Center* : x, y, z = 0, 0, 0

*Grid 2*

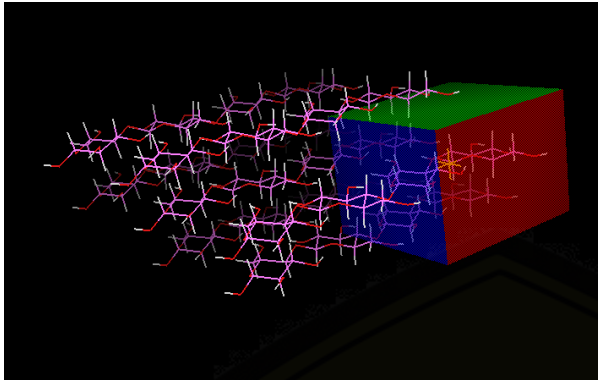
## Keterangan

*Size* : x, y, z = 24, 20, 28

*Center* : x, y, z = 5, 6, -6

*Grid 3*



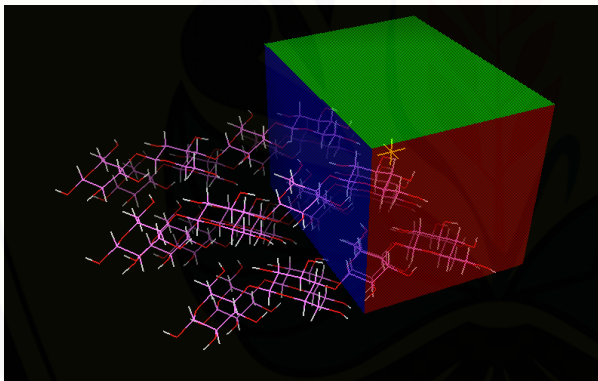


Keterangan

*Size* : x, y, z = 24, 20, 28

*Center* : x, y, z = 8, 0, -6

*Grid 4*

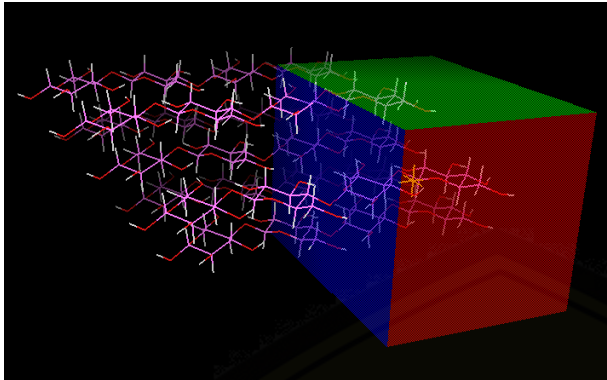


Keterangan

*Size* : x, y, z = 24, 20, 28

*Center* : x, y, z = 5, 6, -6

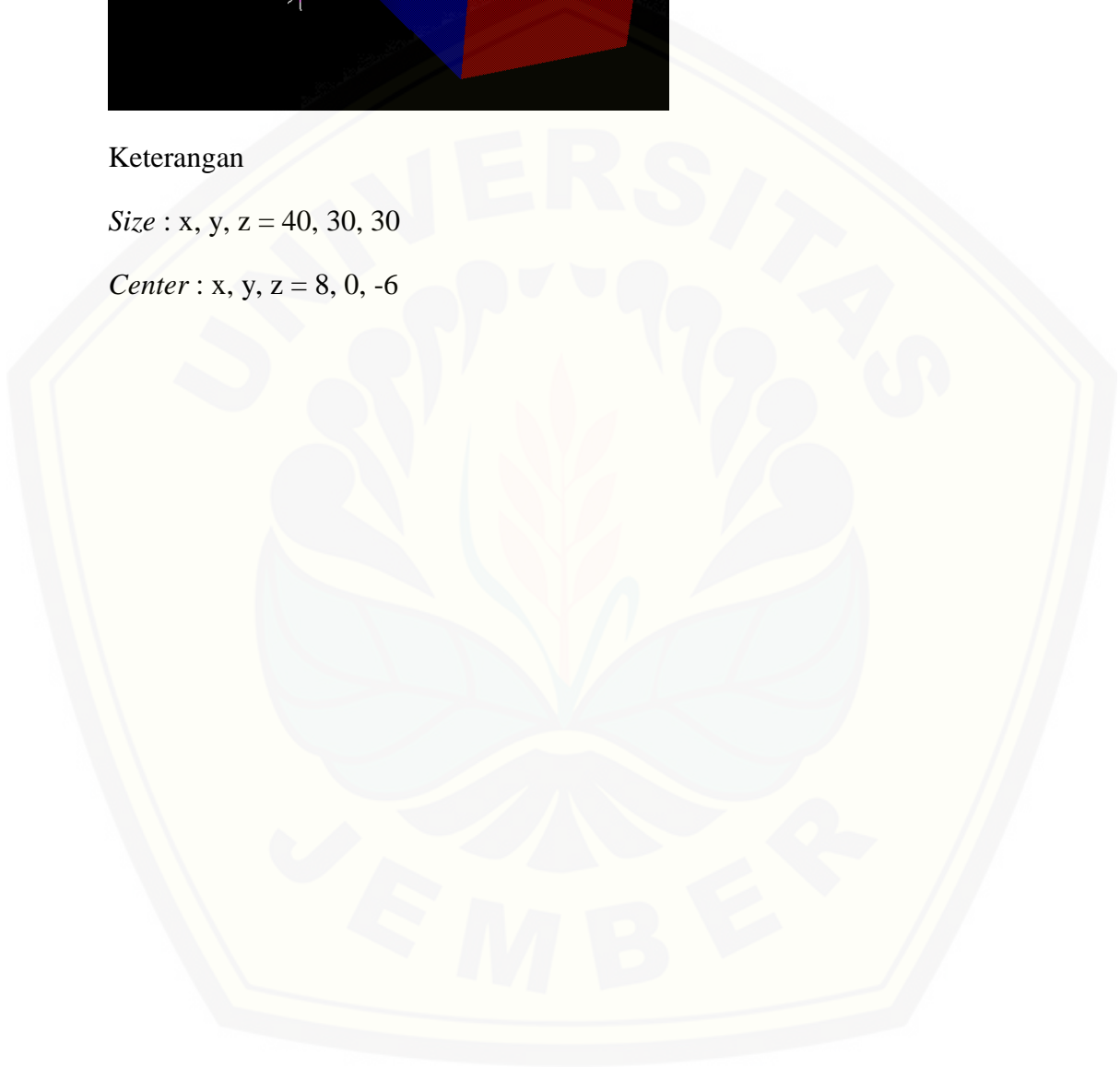
*Grid 5*

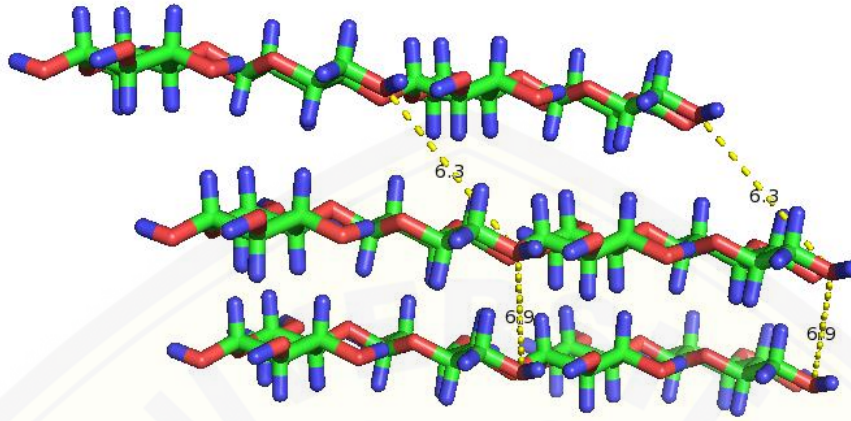


Keterangan

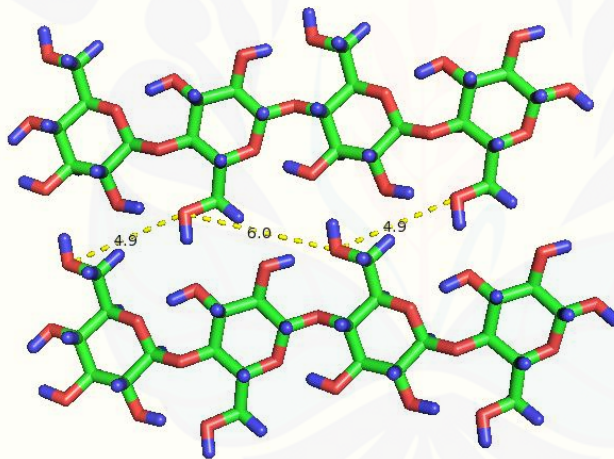
*Size* : x, y, z = 40, 30, 30

*Center* : x, y, z = 8, 0, -6

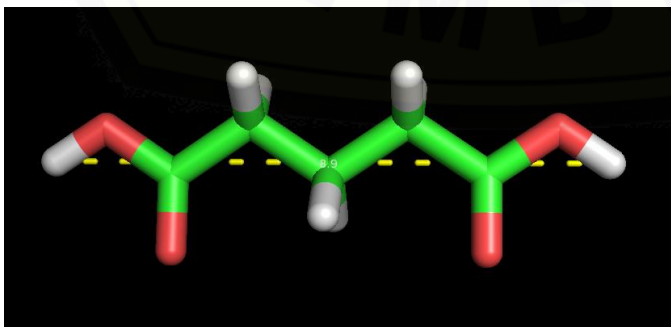


**Lampiran 4.2** Informasi Jarak Selulosa dan Panjang Ligan

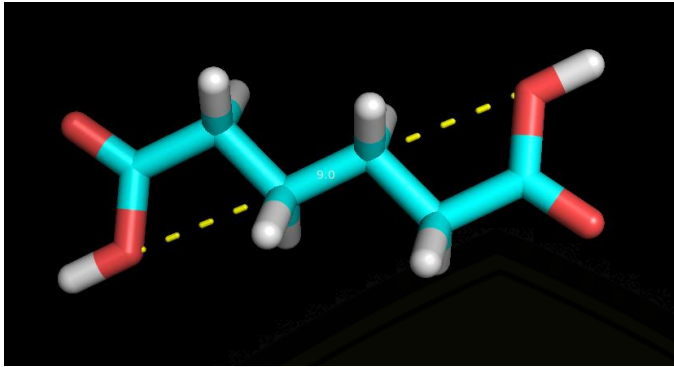
Jarak antar lapisan selulosa



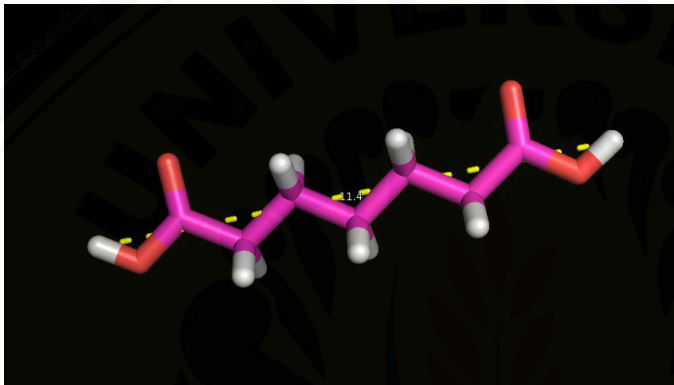
Jarak antar rantai dalam satu lapisan



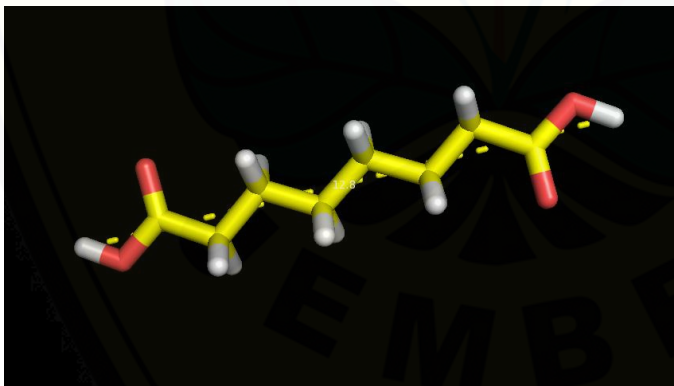
Panjang asam glutarat 8,9Å



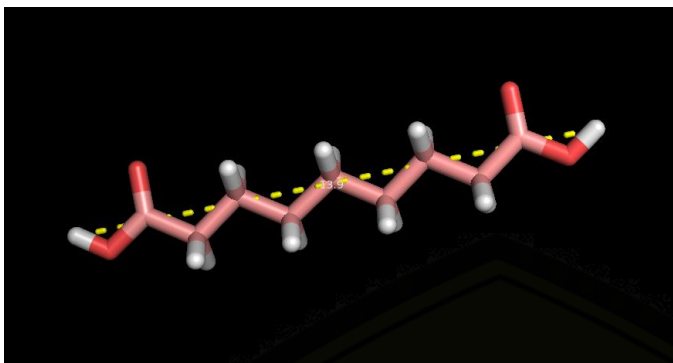
Panjang asam adipat 9,0Å



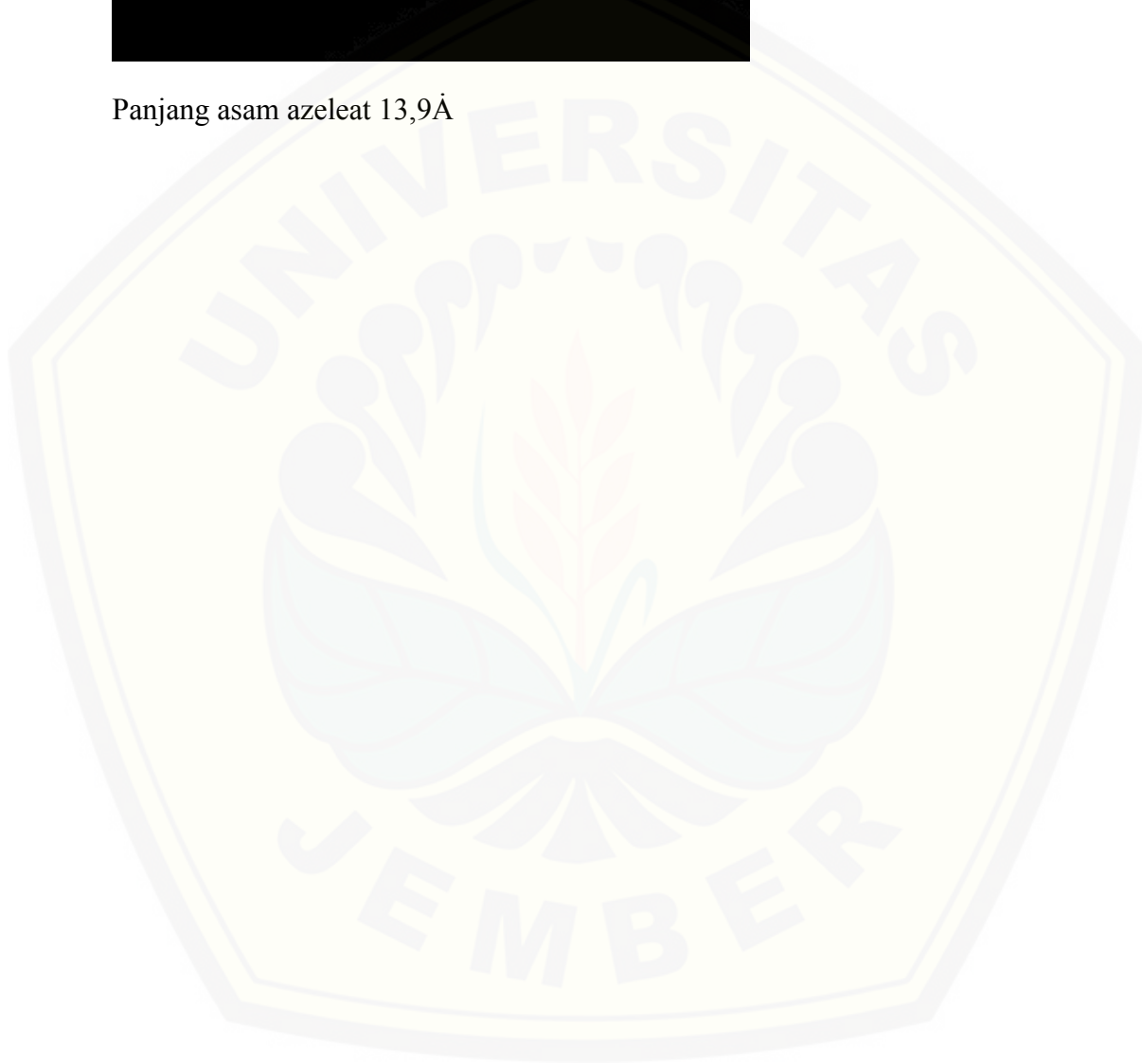
Panjang asam pimelat 11,4Å



Panjang asam suberat 12,8Å



Panjang asam azeleat 13,9Å



**LAMPIRAN 4.3 PERHITUNGAN TERBAIK SETIAP GRID**

Tabel Hasil Docking AutoDock Vina

No.	<i>Grid</i>						<i>Energi (Kcal/mol)</i>				
	<b>Size</b>			<b>Center</b>			Asam	Asam	Asam	Asam	Asam
	x	y	z	x	y	z	Glutarat	Adipat	Pimelat	Suberat	Azeleat
1.	70	30	104	0	0	0	-3,4	-3,3	-3,2	-3,1	-2,7
2.	24	20	28	5	6	-6	-3,1	-3,1	-3,1	-3,1	-3,0
3.	24	20	28	8	0	-6	-3,1	-3,5	-3,1	-3,2	-2,9
4.	40	30	30	5	6	-6	-3,2	-3,4	-3,2	-3,2	-3,2
5.	40	30	30	8	0	-6	-2,9	-3,1	-3,1	-3,0	-3,0

Tabel Hasil AutoDock 4.2.6

No.	<i>Grid</i>						<i>Energi (Kcal/mol)</i>				
	<b>Size</b>			<b>Center</b>			Asam	Asam	Asam	Asam	Asam
	x	y	z	x	y	z	Glutarat	Adipat	Pimelat	Suberat	Azeleat
1.	70	30	104	0	0	0	-2,39	-2,55	-2,42	-2,02	-1,75
2.	24	20	28	5	6	-6	-	-0,79	-0,45	+0,03	-
3.	24	20	28	8	0	-6	-1,58	-1,76	-0,75	-0,13	+0,16
4.	40	30	30	5	6	-6	-1,61	-1,98	-1,27	-1,17	-1,33
5.	40	30	30	8	0	-6	-0,88	-0,16	-1,23	-0,89	-0,31

**LAMPIRAN 4.4 PERHITUNGAN AUTODOCK VINA & AUTODOCK 4.2.6****4.4.1 AutoDock Vina****Asam Glutarat****Grid 1**

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode rmsd l.b.   rmsd u.b.	
1	-3.4	0.000	0.000
2	-3.3	3.880	5.497
3	-3.2	1.224	4.077
4	-3.2	14.749	15.213
5	-3.2	7.329	9.999
6	-3.1	15.334	16.886
7	-3.1	3.873	6.809
8	-3.1	1.515	1.969
9	-3.0	14.492	15.574

**Grid 2**

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode rmsd l.b.   rmsd u.b.	
1	-3.1	0.000	0.000
2	-3.1	11.598	12.660
3	-3.0	0.988	1.773
4	-3.0	0.823	3.872
5	-2.8	1.616	3.852
6	-2.8	1.504	3.889
7	-2.8	12.559	14.950
8	-2.7	1.555	4.212
9	-2.7	1.897	2.636

**Grid 3**

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode rmsd l.b.   rmsd u.b.	
1	-3.2	0.000	0.000
2	-3.1	0.779	3.978
3	-3.1	3.763	6.593
4	-3.1	4.021	5.785
5	-3.0	14.694	15.272
6	-2.9	14.652	15.785
7	-2.7	7.871	10.022
8	-2.7	4.152	5.721
9	-2.7	14.759	15.509

## Grid 4

mode	affinity	dist from best mode	
	(kcal/mol)	rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-3.3	0.000	0.000
2	-3.2	3.633	6.340
3	-3.2	14.943	15.890
4	-3.1	14.956	15.522
5	-3.0	1.522	4.164
6	-3.0	1.650	2.114
7	-2.9	1.082	4.234
8	-2.9	1.571	2.216
9	-2.9	2.482	4.054

## Grid 5

mode	affinity	dist from best mode	
	(kcal/mol)	rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-3.1	0.000	0.000
2	-2.9	15.306	16.441
3	-2.9	10.683	11.869
4	-2.9	11.374	12.450
5	-2.9	10.609	11.838
6	-2.8	11.778	13.089
7	-2.8	16.533	18.331
8	-2.6	8.699	9.185
9	-2.6	10.524	11.734

## Asam Adipat

## Grid 1

mode	affinity	dist from best mode	
	(kcal/mol)	rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-3.3	0.000	0.000
2	-3.2	1.593	1.975
3	-3.2	1.702	2.053
4	-3.2	1.425	4.240
5	-3.2	3.466	4.934
6	-3.2	3.884	6.654
7	-3.1	15.636	16.972
8	-3.1	15.149	16.378
9	-3.1	14.985	15.728

## Grid 2

mode	affinity	dist from best mode	
	(kcal/mol)	rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-3.1	0.000	0.000
2	-3.1	1.260	3.659
3	-3.0	1.408	3.826
4	-3.0	1.481	1.700
5	-2.9	1.745	2.247
6	-2.8	1.406	3.944
7	-2.8	1.864	2.468
8	-2.8	2.031	3.791
9	-2.7	13.170	15.377



**Grid 3**

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode rmsd l.b.   rmsd u.b.	
1	-3.5	0.000	0.000
2	-3.5	1.021	4.655
3	-3.4	15.651	17.389
4	-3.4	4.618	6.421
5	-3.4	15.821	17.591
6	-3.4	4.684	7.435
7	-3.4	15.549	16.854
8	-3.3	15.901	17.113
9	-3.3	4.116	6.918

**Grid 4**

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode rmsd l.b.   rmsd u.b.	
1	-3.4	0.000	0.000
2	-3.2	1.425	1.814
3	-3.2	4.173	6.085
4	-3.2	3.869	6.729
5	-3.2	4.045	7.047
6	-3.2	3.996	5.551
7	-3.1	15.195	16.327
8	-3.1	14.982	15.765
9	-3.0	4.726	7.683

**Grid 5**

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode rmsd l.b.   rmsd u.b.	
1	-3.1	0.000	0.000
2	-3.1	1.401	4.135
3	-3.0	1.925	2.423
4	-2.9	1.997	4.539
5	-2.9	1.755	4.612
6	-2.9	1.600	2.150
7	-2.9	11.384	12.785
8	-2.9	15.154	15.775
9	-2.8	11.317	13.031

**Asam Pimelat****Grid 1**

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode rmsd l.b.   rmsd u.b.	
1	-3.2	0.000	0.000
2	-3.2	1.220	5.168
3	-3.2	15.718	17.460
4	-3.2	15.340	16.679
5	-3.1	15.382	16.565
6	-3.0	15.491	16.274
7	-2.9	1.476	2.062
8	-2.9	3.258	4.782
9	-2.9	15.274	16.070

**Grid 2**

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode	
		rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-3.1	0.000	0.000
2	-3.1	1.813	4.603
3	-3.1	1.184	1.751
4	-3.0	1.149	4.088
5	-2.9	1.480	4.092
6	-2.8	2.055	2.876
7	-2.8	1.843	4.539
8	-2.8	1.575	4.386
9	-2.8	3.290	4.131

**Grid 3**

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode	
		rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-3.1	0.000	0.000
2	-2.9	4.851	6.652
3	-2.9	3.651	5.353
4	-2.9	16.202	17.987
5	-2.9	3.266	6.136
6	-2.8	1.884	4.767
7	-2.7	16.180	18.021
8	-2.6	16.127	17.108
9	-2.6	1.404	1.823

**Grid 4**

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode	
		rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-3.2	0.000	0.000
2	-3.2	3.326	6.621
3	-3.1	15.880	17.359
4	-3.0	1.672	2.185
5	-3.0	2.574	3.096
6	-3.0	2.965	4.259
7	-3.0	15.260	16.611
8	-2.9	15.274	16.370
9	-2.8	15.435	16.420

**Grid 5**

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode	
		rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-3.1	0.000	0.000
2	-3.0	2.023	2.526
3	-3.0	1.312	4.374
4	-2.9	2.648	3.621
5	-2.8	2.439	5.390
6	-2.8	11.718	13.722
7	-2.8	2.953	5.467
8	-2.8	4.705	6.092
9	-2.8	1.844	2.525

## Asam Suberat

## Grid 1

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode	
		rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-3.1	0.000	0.000
2	-3.0	15.416	16.256
3	-2.9	15.255	16.510
4	-2.8	3.703	6.449
5	-2.7	15.546	16.708
6	-2.7	1.893	4.825
7	-2.7	15.220	16.301
8	-2.7	16.168	17.531
9	-2.7	15.984	17.457

## Grid 2

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode	
		rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-3.1	0.000	0.000
2	-3.0	1.701	2.138
3	-3.0	1.074	4.367
4	-3.0	3.163	5.223
5	-3.0	1.895	2.490
6	-3.0	1.750	4.557
7	-2.8	13.056	15.141
8	-2.8	10.374	11.045
9	-2.7	12.122	13.466

## Grid 3

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode	
		rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-3.2	0.000	0.000
2	-3.2	15.376	16.072
3	-3.1	16.134	17.724
4	-3.0	1.814	4.537
5	-3.0	1.034	3.955
6	-3.0	15.146	15.633
7	-3.0	15.509	16.708
8	-3.0	15.283	15.847
9	-2.9	16.029	17.060

## Grid 4

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode	
		rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-3.2	0.000	0.000
2	-3.2	4.320	7.292
3	-3.2	5.318	8.230
4	-3.1	1.451	1.799
5	-3.0	15.804	16.781
6	-3.0	1.789	2.712
7	-2.9	15.749	16.653
8	-2.8	15.654	16.711
9	-2.7	3.055	5.417

**Grid 5**

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode	
		rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-3.0	0.000	0.000
2	-2.9	1.984	2.794
3	-2.8	2.214	5.074
4	-2.7	3.172	4.712
5	-2.7	2.822	4.066
6	-2.7	1.558	2.008
7	-2.6	2.049	3.754
8	-2.6	2.573	5.040
9	-2.5	2.238	3.047

**Asam Azeleat****Grid 1**

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode	
		rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-2.7	0.000	0.000
2	-2.7	2.343	3.078
3	-2.6	1.044	3.902
4	-2.5	2.984	4.216
5	-2.4	3.520	5.076
6	-2.4	16.035	17.260
7	-2.4	2.998	4.209
8	-2.3	13.642	15.032
9	-2.3	2.748	3.867

**Grid 2**

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode	
		rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-3.0	0.000	0.000
2	-2.9	1.892	4.760
3	-2.8	2.221	4.425
4	-2.8	1.703	4.764
5	-2.8	1.913	4.748
6	-2.7	12.163	15.042
7	-2.7	2.018	4.660
8	-2.7	2.632	5.160
9	-2.7	4.659	6.809

**Grid 3**

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode	
		rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-2.9	0.000	0.000
2	-2.7	15.669	16.846
3	-2.5	12.635	14.488
4	-2.5	15.136	17.593
5	-2.5	16.821	18.503
6	-2.5	11.799	13.771
7	-2.5	16.190	17.970
8	-2.5	15.628	16.643
9	-2.5	16.974	18.887

**Grid 4**

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode	
		rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-3.2	0.000	0.000
2	-3.0	4.257	7.445
3	-2.9	3.174	4.375
4	-2.9	4.102	7.307
5	-2.9	15.632	16.252
6	-2.9	15.578	16.864
7	-2.7	15.782	16.887
8	-2.7	15.948	17.154
9	-2.7	4.321	5.444

**Grid 5**

mode	affinity (kcal/mol)	dist from best mode	
		rmsd l.b.	rmsd u.b.
1	-3.0	0.000	0.000
2	-2.9	1.323	4.086
3	-2.8	1.775	4.423
4	-2.8	1.600	2.279
5	-2.8	1.126	4.227
6	-2.7	2.043	2.893
7	-2.7	3.182	5.218
8	-2.6	2.873	6.009
9	-2.6	15.409	16.308

## 4.4.2 AUTODOCK 4.2.6

Asam Glutarat

Grid 1

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	8	-2.39	0.00	12.87	RANKING
1	2	3	-1.48	1.65	14.28	RANKING
2	1	2	-2.31	0.00	11.59	RANKING
3	1	1	-1.90	0.00	13.66	RANKING
4	1	5	-1.84	0.00	11.90	RANKING
4	2	4	-1.50	1.24	12.15	RANKING
5	1	7	-1.38	0.00	11.61	RANKING
5	2	10	-1.27	1.17	11.59	RANKING
6	1	9	-1.28	0.00	9.33	RANKING
7	1	6	-0.96	0.00	8.07	RANKING

Grid 2

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	7	-0.73	0.00	10.41	RANKING
1	2	8	-0.63	0.86	10.21	RANKING
1	3	5	-0.53	0.97	10.77	RANKING
1	4	1	-0.52	0.93	10.37	RANKING
2	1	3	-0.58	0.00	10.47	RANKING
2	2	9	-0.22	0.73	10.77	RANKING
3	1	2	-0.52	0.00	7.83	RANKING
3	2	4	-0.33	1.88	8.07	RANKING
4	1	6	-0.30	0.00	11.60	RANKING
4	2	10	-0.27	1.83	11.35	RANKING

Grid 3

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	8	-1.71	0.00	9.79	RANKING
1	2	2	-1.58	0.72	9.80	RANKING
1	3	4	-1.41	1.68	10.03	RANKING
1	4	1	-1.39	0.88	9.74	RANKING
1	5	5	-1.34	1.65	9.29	RANKING
1	6	9	-1.32	0.91	9.63	RANKING
1	7	3	-1.28	1.19	9.95	RANKING
1	8	10	-1.04	1.57	9.11	RANKING
1	9	6	-1.03	1.30	9.52	RANKING
2	1	7	-1.03	0.00	9.24	RANKING

Grid 4

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	6	-1.61	0.00	9.88	RANKING
1	2	3	-1.49	1.20	9.52	RANKING
1	3	1	-1.47	1.67	9.00	RANKING
1	4	5	-1.46	1.78	8.88	RANKING
1	5	7	-1.23	1.46	10.01	RANKING
1	6	8	-1.07	1.20	9.48	RANKING
1	7	4	-1.03	1.35	9.33	RANKING
1	8	9	-0.83	1.23	9.63	RANKING
1	9	2	-0.62	1.74	9.82	RANKING
1	10	10	-0.61	1.63	9.64	RANKING

Grid 5

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	8	-1.05	0.00	10.30	RANKING
1	2	2	-0.88	1.99	10.30	RANKING
1	3	7	-0.47	1.90	11.01	RANKING
1	4	5	-0.23	1.83	10.50	RANKING
2	1	1	-0.86	0.00	10.38	RANKING
3	1	4	-0.53	0.00	8.18	RANKING
3	2	10	-0.08	1.37	8.24	RANKING
4	1	9	-0.40	0.00	7.67	RANKING
4	2	6	-0.27	1.47	7.94	RANKING
5	1	3	-0.07	0.00	11.52	RANKING

Asam Adipat

Grid 1

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	3	-2.55	0.00	13.27	RANKING
1	2	5	-2.12	1.55	13.38	RANKING
2	1	4	-2.49	0.00	11.11	RANKING
2	2	6	-2.29	1.72	10.81	RANKING
2	3	2	-2.01	1.41	11.31	RANKING
3	1	10	-2.39	0.00	13.00	RANKING
4	1	1	-2.11	0.00	12.68	RANKING
5	1	7	-1.91	0.00	14.56	RANKING
6	1	9	-1.64	0.00	12.11	RANKING
7	1	8	-1.09	0.00	10.99	RANKING

Grid 2

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	5	-0.85	0.00	10.18	RANKING
1	2	4	-0.36	0.95	10.34	RANKING
1	3	8	-0.35	0.95	10.33	RANKING
2	1	3	-0.79	0.00	10.87	RANKING
3	1	7	-0.69	0.00	11.10	RANKING
4	1	10	-0.52	0.00	8.89	RANKING
4	2	6	-0.50	1.01	9.05	RANKING
4	3	1	-0.49	0.71	8.80	RANKING
5	1	2	-0.38	0.00	8.12	RANKING
5	2	9	-0.35	1.03	8.49	RANKING

Grid 3

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	5	-1.76	0.00	9.94	RANKING
1	2	2	-1.63	1.59	9.18	RANKING
1	3	6	-1.47	1.93	8.98	RANKING
1	4	3	-1.46	1.98	9.00	RANKING
1	5	8	-1.32	1.12	9.60	RANKING
1	6	1	-1.00	1.97	8.96	RANKING
2	1	10	-1.58	0.00	8.60	RANKING
2	2	4	-1.45	1.24	8.59	RANKING
2	3	9	-1.36	1.91	8.75	RANKING
2	4	7	-1.09	1.94	8.74	RANKING

Grid 4

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	5	-1.98	0.00	9.72	RANKING
1	2	9	-1.94	0.75	9.59	RANKING
1	3	6	-1.81	0.69	9.70	RANKING
1	4	1	-1.55	1.66	8.96	RANKING
1	5	10	-1.33	1.56	9.31	RANKING
1	6	4	-1.29	1.37	9.03	RANKING
1	7	7	-0.65	1.64	9.18	RANKING
2	1	3	-1.17	0.00	8.84	RANKING
2	2	8	-1.14	0.94	8.71	RANKING
2	3	2	-0.73	0.86	8.89	RANKING



## Grid 5

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	8	-1.43	0.00	12.02	RANKING
2	1	9	-0.88	0.00	10.66	RANKING
2	2	2	-0.16	1.05	11.02	RANKING
3	1	7	-0.68	0.00	10.22	RANKING
3	2	5	-0.65	1.31	10.54	RANKING
3	3	3	-0.56	1.10	10.59	RANKING
4	1	10	-0.51	0.00	8.82	RANKING
4	2	1	-0.38	1.04	8.90	RANKING
5	1	4	-0.31	0.00	10.47	RANKING
6	1	6	-0.22	0.00	8.09	RANKING

## Asam Pimelat

## Grid 1

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	8	-2.42	0.00	11.29	RANKING
1	2	3	-1.98	1.48	11.75	RANKING
2	1	2	-2.24	0.00	12.34	RANKING
3	1	1	-2.15	0.00	13.20	RANKING
3	2	7	-2.14	1.36	13.22	RANKING
3	3	6	-1.92	1.96	13.23	RANKING
4	1	10	-1.81	0.00	10.70	RANKING
5	1	9	-1.77	0.00	12.01	RANKING
6	1	5	-1.72	0.00	12.92	RANKING
7	1	4	-0.69	0.00	13.39	RANKING

## Grid 2

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	6	-0.70	0.00	9.68	RANKING
1	2	2	-0.58	1.32	10.01	RANKING
1	3	1	-0.55	1.91	10.12	RANKING
2	1	7	-0.69	0.00	9.68	RANKING
2	2	3	-0.45	1.46	10.23	RANKING
2	3	10	-0.28	1.87	10.13	RANKING
3	1	8	+0.23	0.00	9.17	RANKING
3	2	5	+0.49	1.27	9.71	RANKING
4	1	4	+0.29	0.00	8.22	RANKING
5	1	9	+0.31	0.00	11.61	RANKING

Grid 3

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	7	-0.75	0.00	8.32	RANKING
1	2	8	-0.74	1.95	9.31	RANKING
1	3	2	-0.69	1.51	8.86	RANKING
1	4	1	-0.67	0.94	8.45	RANKING
1	5	4	-0.56	1.30	8.44	RANKING
2	1	6	-0.59	0.00	9.14	RANKING
2	2	9	-0.54	1.93	9.76	RANKING
2	3	5	-0.27	1.50	9.89	RANKING
2	4	10	-0.13	1.43	9.73	RANKING
2	5	3	+0.10	1.75	9.30	RANKING

Grid 4

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	8	-1.27	0.00	9.79	RANKING
1	2	4	-1.18	1.18	9.55	RANKING
1	3	7	-1.17	1.25	9.24	RANKING
1	4	6	-1.15	1.52	10.28	RANKING
1	5	9	-1.12	1.39	9.17	RANKING
1	6	1	-1.00	1.32	9.56	RANKING
2	1	3	-1.19	0.00	9.04	RANKING
2	2	5	-0.74	1.93	8.93	RANKING
2	3	2	-0.51	1.81	9.19	RANKING
2	4	10	-0.18	1.87	9.03	RANKING

Grid 5

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	3	-1.37	0.00	11.01	RANKING
1	2	2	-0.66	1.47	11.24	RANKING
2	1	4	-1.23	0.00	10.11	RANKING
2	2	10	-0.03	1.89	11.20	RANKING
2	3	6	+0.10	1.58	10.54	RANKING
3	1	7	-0.61	0.00	9.44	RANKING
4	1	9	-0.21	0.00	8.35	RANKING
4	2	1	+0.02	1.22	8.78	RANKING
5	1	8	-0.17	0.00	11.21	RANKING
6	1	5	+0.51	0.00	8.45	RANKING

## Asam Suberat

## Grid 1

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	1	-2.02	0.00	11.72	RANKING
1	2	8	-1.86	1.71	11.75	RANKING
2	1	2	-1.76	0.00	8.49	RANKING
3	1	10	-1.68	0.00	13.32	RANKING
3	2	4	-1.61	1.86	12.98	RANKING
4	1	7	-1.67	0.00	13.72	RANKING
5	1	6	-1.66	0.00	13.39	RANKING
6	1	9	-1.46	0.00	11.50	RANKING
7	1	5	-0.91	0.00	11.64	RANKING
8	1	3	-0.51	0.00	13.05	RANKING

## Grid 2

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	6	-0.61	0.00	9.72	RANKING
1	2	8	-0.40	1.62	9.92	RANKING
1	3	10	-0.40	1.72	9.55	RANKING
1	4	7	-0.37	1.64	9.64	RANKING
1	5	2	-0.35	1.93	9.83	RANKING
2	1	4	-0.50	0.00	9.58	RANKING
3	1	5	-0.38	0.00	8.12	RANKING
3	2	1	+0.24	1.95	8.34	RANKING
4	1	3	+0.03	0.00	10.86	RANKING
4	2	9	+0.70	1.99	10.04	RANKING

## Grid 3

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	8	-0.45	0.00	8.87	RANKING
1	2	9	-0.13	1.87	9.54	RANKING
1	3	6	-0.11	1.12	8.67	RANKING
1	4	4	-0.01	1.18	8.12	RANKING
1	5	7	+0.20	1.40	9.10	RANKING
2	1	5	-0.32	0.00	9.88	RANKING
2	2	10	-0.13	1.59	9.01	RANKING
2	3	3	+0.35	1.92	9.07	RANKING
2	4	1	+0.86	1.94	10.27	RANKING
3	1	2	+1.47	0.00	8.47	RANKING

Grid 4

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	5	-1.30	0.00	9.70	RANKING
1	2	10	-1.20	1.09	10.06	RANKING
1	3	1	-1.17	1.25	9.94	RANKING
1	4	6	-1.16	1.51	9.33	RANKING
1	5	2	-1.12	1.62	8.68	RANKING
1	6	7	-0.77	1.76	9.35	RANKING
2	1	4	-1.11	0.00	8.75	RANKING
2	2	8	-0.29	1.70	8.44	RANKING
3	1	3	-0.62	0.00	8.64	RANKING
4	1	9	-0.43	0.00	7.99	RANKING

Grid 5

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	2	-1.11	0.00	11.14	RANKING
1	2	9	-0.89	1.46	11.09	RANKING
1	3	10	-0.66	2.00	11.30	RANKING
2	1	6	-0.85	0.00	10.05	RANKING
3	1	5	-0.85	0.00	11.05	RANKING
4	1	1	-0.69	0.00	9.64	RANKING
5	1	3	-0.47	0.00	10.61	RANKING
5	2	7	-0.18	1.31	10.53	RANKING
6	1	4	-0.26	0.00	8.03	RANKING
6	2	8	-0.02	1.53	8.12	RANKING

Asam Azeleat

Grid 1

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	3	-1.75	0.00	11.77	RANKING
1	2	2	+0.05	1.59	13.35	RANKING
2	1	6	-1.56	0.00	11.93	RANKING
3	1	9	-1.42	0.00	12.29	RANKING
3	2	4	-1.36	1.93	12.00	RANKING
4	1	1	-1.34	0.00	14.04	RANKING
5	1	8	-1.33	0.00	15.00	RANKING
6	1	7	-1.31	0.00	12.86	RANKING
7	1	10	-1.09	0.00	6.86	RANKING
8	1	5	-1.05	0.00	13.29	RANKING

Grid 2

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	5	-0.50	0.00	9.74	RANKING
1	2	8	-0.43	1.84	9.94	RANKING
1	3	7	-0.36	1.35	9.43	RANKING
1	4	6	-0.35	1.99	10.03	RANKING
1	5	2	-0.30	1.31	9.56	RANKING
1	6	9	-0.29	1.43	9.95	RANKING
1	7	10	-0.26	1.48	9.61	RANKING
1	8	3	-0.17	1.27	9.83	RANKING
2	1	4	-0.30	0.00	9.87	RANKING
3	1	1	-0.07	0.00	8.30	RANKING

Grid 3

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	2	-0.35	0.00	8.63	RANKING
1	2	10	+0.16	1.50	8.69	RANKING
1	3	9	+0.20	1.96	8.74	RANKING
1	4	8	+0.68	1.57	9.21	RANKING
1	5	1	+0.91	1.61	9.07	RANKING
1	6	4	+1.48	1.91	9.20	RANKING
1	7	5	+1.86	1.22	8.41	RANKING
2	1	7	+0.40	0.00	8.83	RANKING
2	2	6	+0.47	1.53	9.53	RANKING
3	1	3	+2.80	0.00	8.99	RANKING

Grid 4

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	3	-1.33	0.00	9.21	RANKING
1	2	2	-1.29	1.01	9.68	RANKING
1	3	8	-1.22	1.34	9.58	RANKING
1	4	9	-1.03	1.07	9.42	RANKING
1	5	1	-0.78	2.00	9.90	RANKING
1	6	6	-0.58	1.87	9.47	RANKING
2	1	10	-0.55	0.00	8.25	RANKING
3	1	4	-0.54	0.00	8.12	RANKING
3	2	7	+0.24	1.45	7.72	RANKING
4	1	5	+0.87	0.00	8.13	RANKING

Grid 5

Rank	Sub-Rank	Run	Binding Energy	Cluster RMSD	Reference RMSD	Grep Pattern
1	1	10	-0.73	0.00	9.64	RANKING
1	2	1	-0.59	1.81	9.53	RANKING
1	3	3	-0.58	1.85	9.57	RANKING
1	4	2	-0.31	1.65	10.16	RANKING
2	1	4	-0.52	0.00	7.90	RANKING
2	2	5	+0.42	1.93	8.36	RANKING
2	3	7	+0.57	1.69	8.44	RANKING
3	1	9	+0.27	0.00	8.84	RANKING
3	2	6	+0.63	1.28	9.13	RANKING
4	1	8	+0.96	0.00	11.20	RANKING