

DAFTAR PUSTAKA

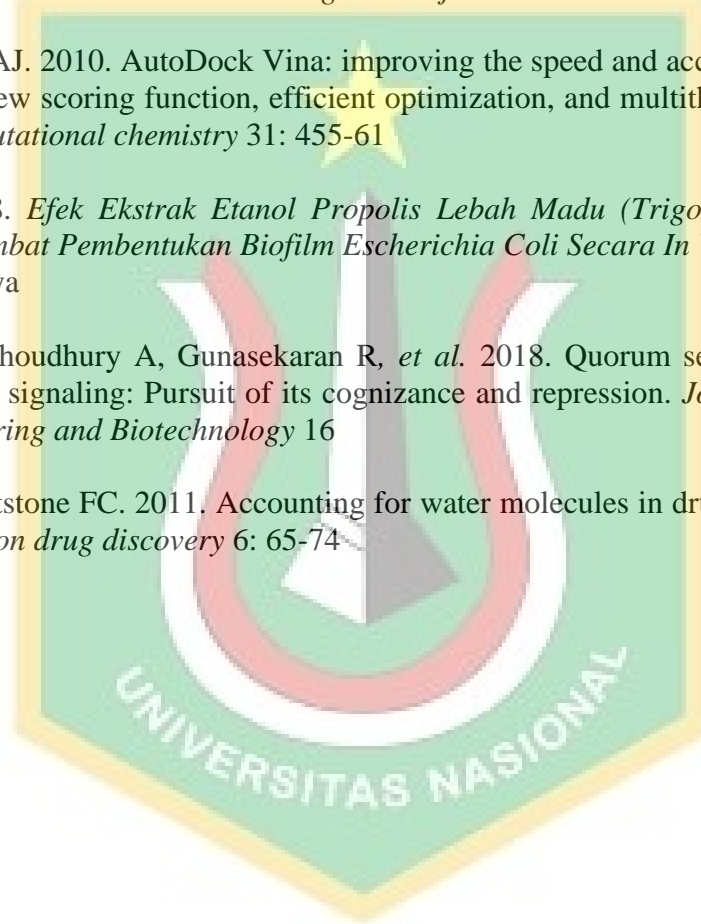
- Arciola CR, Campoccia D, Ravaioli S, *et al.* 2015. Polysaccharide intercellular adhesin in biofilm: structural and regulatory aspects. *Frontiers in cellular and infection microbiology* 5: 7
- Bahi RRR, Herowati R, Harmastuti N. 2020. Studi Biokemoinformatika Kandungan Kimia Daun Sambiloto (*Andrographis paniculata* (Burm. f.) Nees) sebagai Antihiperqlikemia serta Prediksi Parameter Farmakokinetik dan Toksisitas. *PHARMACY: Jurnal Farmasi Indonesia (Pharmaceutical Journal of Indonesia)* 17: 466-77
- Banerjee P, Eckert AO, Schrey AK, *et al.* 2018. ProTox-II: a webserver for the prediction of toxicity of chemicals. *Nucleic Acids Research* 46: W257-W63
- Bare Y, Sari DRT, Rachmad YT, *et al.* 2019. In silico insight the prediction of chlorogenic acid in coffee through Cyclooxygenase-2 (COX2) Interaction. *Biogenesis: Jurnal Ilmiah Biologi* 7: 100-5
- Bazargani MM, Rohloff J. 2016. Antibiofilm activity of essential oils and plant extracts against *Staphylococcus aureus* and *Escherichia coli* biofilms. *Food control* 61: 156-64
- Bell EW, Zhang Y. 2019. DockRMSD: an open-source tool for atom mapping and RMSD calculation of symmetric molecules through graph isomorphism. *Journal of Cheminformatics* 11: 1-9
- Craft KM, Nguyen JM, Berg LJ, *et al.* 2019. Methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA): antibiotic-resistance and the biofilm phenotype. *MedChemComm* 10: 1231-41
- Daina A, Michielin O, Zoete V. 2017. SwissADME: a free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. *Scientific reports* 7: 1-13
- Dallakyan S, Olson A. 2015. Small-Molecule Library Screening by Docking with PyRx. *Methods in molecular biology (Clifton, N.J.)* 1263: 243-50
- Darwis D. 2013. Uji praklinis pembalut luka hidrogel berbasis PVP steril iradiasi menggunakan tikus putih: Evaluasi iritasi dan sensitisasi. *Jurnal Ilmiah Aplikasi Isotop dan Radiasi* 4
- Duarte A, Luís Â, Oleastro M, *et al.* 2016. Antioxidant properties of coriander essential oil and *Linalool* and their potential to control *Campylobacter* spp. *Food Control* 61: 115-22

- Duke JA. 2016. Dr. Duke's Phytochemical and Ethnobotanical Databases. <https://data.nal.usda.gov/dataset/dr-dukes-phytochemical-and-ethnobotanical-databases>. Diakses pada 01 Agustus
- Ekowati J, Diyah NW, Nofianti KA, *et al.* 2018. Molecular Docking of Ferulic Acid Derivatives on P2Y₁₂ Receptor and their ADMET Prediction. *Journal of Mathematical and Fundamental Sciences* 50: 203-19
- Farooq A, Muhammad S, Abdullah IH, *et al.* 2011. Physicochemical composition of hydro-distilled essential oil from coriander (*Coriandrum sativum* L.) seeds cultivated in Pakistan. *Journal of Medicinal Plants Research* 5: 3537-44
- Ferwadi S, Gunawan R, Astuti W. 2017. Studi Docking Molekular Senyawa Asam Sinamat Dan Derivatnya Sebagai Inhibitor Protein Ij4x Pada Sel Kanker Serviks. *Jurnal Kimia Mulawarman* 14: 84-90
- Hadži D, Kidrič J, Koller J, *et al.* 1990. The role of hydrogen bonding in drug-receptor interactions. *Journal of Molecular Structure* 237: 139-50
- Hamidah r. 2021. Uji aktivitas antibakteri ekstrak biji ketumbar (*coriandrum sativum* l) terhadap bakteri *bacillus cereus atcc 11778* secara *in vitro*. Stikes Karya Putra Bangsa Tulungagung
- Hardjono S. 2017. Prediksi sifat farmakokinetik, toksisitas dan aktivitas sitotoksik turunan N-benzoil-N'-(4-fluorofenil) tiourea sebagai calon obat antikanker melalui pemodelan molekul. *Jurnal Ilmu Kefarmasian Indonesia* 14: 246-55
- Haryanto EE, Sasongkowati R, Woelansari ED. 2019. Studi Insilico Aktivitas Antioksidan dan ADMET Brazilein Kayu Secang (*Caesalpinia sappan* L.) terhadap *Escherichia coli* Extended Spectrum Beta-Lactamase (ESBL)(Kandidat Suplemen Penguat Sistem Imun). Presented at Prosiding Seminar Nasional Kesehatan Poltekkes Kemenkes Surabaya
- Hirko B, Abera S, Haimanot M, *et al.* 2019. Chemical Composition of Essential Oils from Released Coriander Variety (*Coriandrum sativum* L.) Grown In Ethiopia. *Results of Crop Improvement and Management Research 2018*
- Holt MP, Ju C. 2006. Mechanisms of drug-induced liver injury. *Aaps j* 8: E48-54
- Hubbard RE, Haider MK. 2010. Hydrogen bonds in proteins: role and strength. *eLS*
- Kesuma D, Purwanto BT, Hardjono S. 2018. Uji in silico aktivitas sitotoksik dan toksisitas senyawa Turunan N-(Benzoil)-N'-feniltiourea sebagai calon obat antikanker. *Journal of Pharmaceutical Science and Clinical Research* 3: 1-11

- Khatoon Z, McTiernan CD, Suuronen EJ, *et al.* 2018. Bacterial biofilm formation on implantable devices and approaches to its treatment and prevention. *Heliyon* 4: e01067
- Kırmusaoğlu S. 2016. Staphylococcal biofilms: Pathogenicity, mechanism and regulation of biofilm formation by quorum sensing system and antibiotic resistance mechanisms of biofilm embedded microorganisms. *Microbial biofilms: importance and applications. IntechOpen*: 189-209
- Kokare C, Chakraborty S, Khopade A, *et al.* 2009. Biofilm: importance and applications.
- Leonard PG, Bezar IF, Sidote DJ, *et al.* 2012. Identification of a hydrophobic cleft in the LytTR domain of AgrA as a locus for small molecule interactions that inhibit DNA binding. *Biochemistry* 51: 10035-43
- Li Y-H, Tian X. 2012. Quorum sensing and bacterial social interactions in biofilms. *Sensors* 12: 2519-38
- Liébana R, Arregui L, Santos A, *et al.* 2016. Unravelling the interactions among microbial populations found in activated sludge during biofilm formation. *FEMS microbiology ecology* 92
- Lynch T, Neff AP. 2007. The effect of cytochrome P450 metabolism on drug response, interactions, and adverse effects. *American family physician* 76: 391-6
- Mah T-FC, O'Toole GA. 2001. Mechanisms of biofilm resistance to antimicrobial agents. *Trends in microbiology* 9: 34-9
- McDonnell AM, Dang CH. 2013. Basic review of the cytochrome p450 system. *J Adv Pract Oncol* 4: 263-8
- Mehrishi P, Agarwal P, Broor S, *et al.* 2020. Antibacterial and antibiofilm properties of medicinal plant extracts against multi drug resistant Staphylococcus species and non fermenter bacteria. *J Pure Appl Microbiol* 14: 403-13
- Meilina R, Rosdiana E, Rezeki S, *et al.* 2021. Pemanfaatan biji ketumbar sebagai salah satu pilihan pengobatan luka. *Jurnal Pengabdian Kepada Masyarakat (Kesehatan)* 3: 119-24
- Morris GM, Huey R, Lindstrom W, *et al.* 2009. AutoDock4 and AutoDockTools4: Automated docking with selective receptor flexibility. *J Comput Chem* 30: 2785-91

- Msaada K, Hosni K, Taarit MB, *et al.* 2007. Changes on essential oil composition of coriander (*Coriandrum sativum* L.) fruits during three stages of maturity. *Food chemistry* 102: 1131-4
- O'Boyle NM, Banck M, James CA, *et al.* 2011. Open Babel: An open chemical toolbox. *Journal of Cheminformatics* 3: 33
- O'Gara JP. 2007. ica and beyond: biofilm mechanisms and regulation in *Staphylococcus epidermidis* and *Staphylococcus aureus*. *FEMS microbiology letters* 270: 179-88
- Pang KS. 2003. Modeling of intestinal drug absorption: roles of transporters and metabolic enzymes (for the Gillette Review Series). *Drug metabolism and disposition* 31: 1507-19
- Peiqian L, Xiaoming P, Huifang S, *et al.* 2014. Biofilm formation by *Fusarium oxysporum* f. sp. *cucumerinum* and susceptibility to environmental stress. *FEMS Microbiology Letters* 350: 138-45
- Pires DE, Blundell TL, Ascher DB. 2015. pkCSM: Predicting Small-Molecule Pharmacokinetic and Toxicity Properties Using Graph-Based Signatures. *J Med Chem* 58: 4066-72
- Rudnitskaya A, Török B, Török M. 2010. Molecular docking of enzyme inhibitors: A COMPUTATIONAL TOOL FOR STRUCTURE-BASED DRUG DESIGN. *Biochemistry and Molecular Biology Education* 38: 261-5
- Rustam E, Masri M, Arifin H. 2011. LD-50 and Delayed Toxicity Study of the Ethanol Extract of *Nothopanax Scutellarium* Merr. Leave. *Jurnal Medika Planta* 1: 246295
- Ruswanto R. 2015. molecular docking empat turunan isonicotinohidrazide pada mycobacterium tuberculosis enoyl-acyl carrier protein reductase (InhA). *Jurnal Kesehatan Bakti Tunas Husada: Jurnal Ilmu-ilmu Keperawatan, Analisis Kesehatan dan Farmasi* 13
- Saeki EK, Kobayashi RKT, Nakazato G. 2020. Quorum sensing system: Target to control the spread of bacterial infections. *Microbial pathogenesis* 142: 104068
- Sardi A. 2021. *Infeksi Nosokomial: Jenis Infeksi dan Patogen Penyebabnya*. Presented at Seminar Nasional Riset Kedokteran
- Shofi M. 2021. Analysis of α -spinasterol Compounds in Trembesi Seeds (*Samanea saman* (jacq.) Merr) Against Inhibition of 3C-like Protease SARS-CoV-2 Through In Silico Test. *Jurnal Sintesis: Penelitian Sains, Terapan dan Analisisnya* 2: 74-88

- Singh R, Ray P, Das A, *et al.* 2010. Penetration of antibiotics through *Staphylococcus aureus* and *Staphylococcus epidermidis* biofilms. *J Antimicrob Chemother* 65: 1955-8
- Srivastava SK, Rajasree K, Fasim A, *et al.* 2014. Influence of the AgrC-AgrA complex on the response time of *Staphylococcus aureus* quorum sensing. *J Bacteriol* 196: 2876-88
- Suharna S. 2012. Studi In Silico Senyawa Turunan Flavonoid Terhadap Penghambatan Enzim Tirosinase. *Makassar: Program Sarjana UIN Alauddin*
- Trott O, Olson AJ. 2010. AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading. *Journal of computational chemistry* 31: 455-61
- Utari NR. 2018. *Efek Ekstrak Etanol Propolis Lebah Madu (Trigona Spp) Sebagai Penghambat Pembentukan Biofilm Escherichia Coli Secara In Vitro*. Universitas Brawijaya
- Vadakkan K, Choudhury A, Gunasekaran R, *et al.* 2018. Quorum sensing intervened bacterial signaling: Pursuit of its cognizance and repression. *Journal of Genetic Engineering and Biotechnology* 16
- Wong SE, Lightstone FC. 2011. Accounting for water molecules in drug design. *Expert opinion on drug discovery* 6: 65-74





LAMPIRAN I. TABEL LAMPIRAN

Tabel Lampiran 1. Senyawa aktif minyak atsiri ketumbar

Senyawa Aktif	IUPAC
<i>1,8-Cineol</i>	4,6,6-trideuterio-1,3,3-trimethyl-2-oxabicyclo[2.2.2]octane
<i>α-Caryophyllene</i>	2,6,6,9-tetramethylcycloundeca-1,4,8-triene
<i>α-Pinene</i>	2,6,6-trimethylbicyclo[3.1.1]hept-2-ene
<i>Anethole</i>	1-methoxy-4-[(E)-prop-1-enyl]benzene
<i>β-Caryophyllene</i>	(1R,4E,9S)-4,11,11-trimethyl-8-methylidenebicyclo[7.2.0]undec-4-ene
<i>β-Myrcene</i>	8,8,8-trideuterio-3-methylidene-7-(trideuteriomethyl)octa-1,6-diene
<i>β-Ocimene</i>	(3E)-3,7-dimethylocta-1,3,6-triene
<i>β-Pinene</i>	6,6-dimethyl-2-methylidenebicyclo[3.1.1]heptane
<i>Borneol</i>	1,7,7-trimethylbicyclo[2.2.1]heptan-2-ol
<i>Camphene</i>	2,2-dimethyl-3-methylidenebicyclo[2.2.1]heptane
<i>Camphor</i>	1,7,7-trimethylbicyclo[2.2.1]heptan-2-one
<i>Carvacrol</i>	2-methyl-5-propan-2-ylphenol
<i>Carvone</i>	2-methyl-5-prop-1-en-2-ylcyclohex-2-en-1-one
<i>Cis-Dihydrocarvone</i>	(2R,5S)-2-methyl-5-prop-1-en-2-ylcyclohexan-1-one
<i>Citronellal</i>	3,7-dimethyloct-6-enal
<i>Decanal</i>	<i>Decanal</i>
<i>D-Elemene</i>	(4S,5S)-4-ethenyl-4-methyl-1-propan-2-yl-5-prop-1-en-2-ylcyclohexene
<i>Dodecanal</i>	<i>Dodecanal</i>
<i>Eugenol Acetate</i>	(2-methoxy-4-prop-2-enylphenyl) acetate
<i>Eugenol</i>	2-methoxy-4-prop-2-enylphenol
<i>γ-Terpinene</i>	1-methyl-4-propan-2-ylcyclohexa-1,4-diene
<i>Geranial</i>	(2E)-3,7-dimethylocta-2,6-dienal
<i>Geraniol</i>	(2E)-3,7-dimethylocta-2,6-dien-1-ol
<i>Geranyl Acetate</i>	[(2E)-3,7-dimethylocta-2,6-dienyl] acetate

Tabel Lampiran 1. Senyawa aktif minyak atsiri ketumbar

Senyawa Aktif	IUPAC
<i>Germacrene</i>	(1E,5E,8R)-1,5-dimethyl-8-prop-1-en-2-ylcyclodeca-1,5-diene
<i>Heptanol</i>	heptan-1-ol
<i>Limonene</i>	1-methyl-4-prop-1-en-2-ylcyclohexene
<i>Linalool</i>	3,7-dimethylocta-1,6-dien-3-ol
<i>Menthol</i>	5-methyl-2-propan-2-ylcyclohexan-1-ol
<i>Neral</i>	(2Z)-3,7-dimethylocta-2,6-dienal
<i>Nerol</i>	(2Z)-3,7-dimethylocta-2,6-dien-1-ol
<i>P-Cymene</i>	1-methyl-4-propan-2-ylbenzene
<i>Sabinene</i>	4-methylidene-1-propan-2-ylbicyclo[3.1.0]hexane

Tabel Lampiran 2. Nilai energi bebas ikatan ligan alami dan ligan uji terhadap protein 4BXI dan 4G4K

Senyawa Aktif	Energi Ikatan (Kkal/mol)	
	4BXI	4G4K
Ligan Alami	-2,9	-2,1
<i>1,8-Cineol</i>	-4,1	-
<i>α-Caryophyllene</i>	-	-
<i>α-Pinene</i>	-4,0	-
<i>Anethole</i>	-	-
<i>β-Caryophyllene</i>	-	-
<i>β-Myrcene</i>	-3,6	-2,3
<i>β-Ocimene</i>	-3,2	-2,2
<i>β-Pinene</i>	-4,0	-
<i>Borneol</i>	-4,1	-
<i>Camphene</i>	-4,0	-1,6
<i>Camphor</i>	-3,6	-
<i>Carvacrol</i>	-3,5	-2,7
<i>Carvone</i>	-3,4	-1,7
<i>Cis-Dihydrocarvone</i>	-4,2	-2,6

Tabel Lampiran 2. Nilai energi bebas ikatan ligan alami dan ligan uji terhadap protein 4BXI dan 4G4K

Senyawa Aktif	Energi Ikatan (Kkal/mol)	
	4BXI	4G4K
<i>Citronellal</i>	-3,6	-2,3
<i>Decanal</i>	-3,1	-2,0
<i>D-Elemene</i>	-	-
<i>Dodecanal</i>	-2,3	-1,4
<i>Eugenol Acetate</i>	-	-
<i>Eugenol</i>	-3,4	-1,9
<i>γ-Terpinene</i>	-3,5	-2,0
<i>Geranial</i>	-3,0	-1,5
<i>Geraniol</i>	-3,5	-1,9
<i>Geranyl Acetate</i>	-2,7	-1,4
<i>Germacrene</i>	-	-
<i>Heptanol</i>	-3,2	-2,1
<i>Limonene</i>	-3,5	-2,2
<i>Linalool</i>	-3,2	-2,3
<i>Menthol</i>	-3,8	-1,7
<i>Neral</i>	-3,5	-2,3
<i>Nerol</i>	-3,4	-2,2
<i>P-Cymene</i>	-3,5	-2,2
<i>Sabinene</i>	-3,9	-2,0

Tabel Lampiran 3. Jenis interaksi residu asam amino

Senyawa Aktif	Kategori Ikatan	Jenis Ikatan	Jarak Ikatan (Å)	Residu Asam Amino
4BXI				
Ligan Alami	Hidrogen	Konvensional	2,47	LEU A:324
<i>1,8-Cineol</i>	Hidrofobik	Alkil	4,60	VAL A:290
<i>α-Pinene</i>	Hidrofobik	Alkil	5,40	VAL A:290
	Hidrofobik	Alkil	5,47	MET A:326

Tabel Lampiran 3. Jenis interaksi residu asam amino

Senyawa Aktif	Kategori Ikatan	Jenis Ikatan	Jarak Ikatan (Å)	Residu Asam Amino
<i>β-Myrcene</i>	Hidrofobik	Alkil	4,48	VAL A:290
	Hidrofobik	Alkil	5,13	ILE A:322
	Hidrofobik	Alkil	4,79	MET A:326
<i>β-Ocimene</i>	Hidrofobik	Alkil	5,05	VAL A:290
	Hidrofobik	Alkil	5,01	MET A:326
	Hidrofobik	Alkil	5,36	LEU A:329
	Hidrofobik	Alkil	4,51	ILE A:293
<i>β-Pinene</i>	Hidrofobik	Alkil	5,02	VAL A:290
Borneol	Hidrogen	Konvensional	1,95	LEU A:324
	Hidrofobik	Alkil	5,05	VAL A:290
<i>Camphene</i>	Hidrofobik	Alkil	4,92	VAL A:290
	Hidrofobik	Alkil	4,90	MET A:326
	Hidrofobik	Alkil	4,42	LEU A:329
<i>Camphor</i>	Hidrofobik	Alkil	5,01	VAL A:290
	Hidrofobik	Alkil	5,36	LEU A:329
<i>Carvacrol</i>	Elektrostatik	Pi-Anion	4,27	GLU A:292
<i>Carvone</i>	Hidrogen	Konvensional	2,36	MET A:326
<i>Cis-Dihydrocarvone</i>	Hidrogen	Konvensional	2,65	MET A:326
<i>Citronellal</i>	Hidrogen	Konvensional	2,32	MET A:326
	Hidrofobik	Alkil	4,13	VAL A:290
<i>Decanal</i>	Hidrogen	Konvensional	1,97	ILE A: 322
	Hidrofobik	Alkil	4,98	MET A:326
	Hidrofobik	Alkil	4,80	VAL A:290
	Hidrofobik	Alkil	4,77	ILE A:293
	Hidrofobik	Alkil	4,66	LEU A:329
<i>Eugenol</i>	Hidrofobik	Alkil	4,85	VAL A:290
	Hidrofobik	Alkil	4,47	ILE A:293
	Hidrofobik	Alkil	4,59	MET A:326
	Hidrofobik	Alkil	4,40	LEU A:329
<i>γ-Terpinene</i>	Hidrofobik	Alkil	5,00	VAL A:290
	Hidrofobik	Alkil	4,69	ILE A:293
	Hidrofobik	Alkil	4,47	MET A:326
	Hidrofobik	Alkil	4,41	LEU A:329
<i>Geranial</i>	Hidrogen	Karbon-Hidrogen	3,62	SER A:321
	Hidrofobik	Alkil	4,93	VAL A:290
	Hidrofobik	Alkil	4,60	MET A:326
	Hidrofobik	Alkil	4,81	LEU A:329
<i>Geraniol</i>	Hidrofobik	Alkil	4,89	VAL A:290

Tabel Lampiran 3. Jenis interaksi residu asam amino

Senyawa Aktif	Kategori Ikatan	Jenis Ikatan	Jarak Ikatan (Å)	Residu Asam Amino
	Hidrofobik	Alkil	5,26	MET A:326
	Hidrofobik	Alkil	5,35	LEU A:329
	Hidrofobik	Alkil	4,65	ILE A:293
<i>Heptanol</i>	Hidrofobik	Alkil	4,26	VAL A:290
	Hidrofobik	Alkil	5,13	ILE A:322
	Hidrofobik	Alkil	4,63	MET A:326
<i>Limonene</i>	Hidrofobik	Alkil	4,65	VAL A:290
	Hidrofobik	Alkil	5,05	ILE A:293
	Hidrofobik	Alkil	4,51	MET A:326
	Hidrofobik	Alkil	4,51	LEU A:329
<i>Linalool</i>	Hidrofobik	Alkil	4,52	VAL A: 290
	Hidrofobik	Alkil	5,42	ILE A:322
<i>Menthol</i>	Hidrogen	Konvensional	2,51	LEU A:324
	Hidrofobik	Alkil	5,42	VAL A:290
<i>Neral</i>	Hidrogen	Konvensional	2,73	MET A:326
	Hidrofobik	Alkil	4,49	VAL A: 290
	Hidrofobik	Alkil	5,43	ILE A:322
<i>Nerol</i>	Hidrofobik	Alkil	4,41	VAL A:290
	Hidrofobik	Alkil	5,37	ILE A:322
<i>P-Cymene</i>	Elektrostatik	Pi-Anion	4,14	GLU A:292
	Hidrofobik	Alkil	5,05	VAL A:290
	Hidrofobik	Alkil	4,73	ILE A:293
<i>Sabinene</i>	Hidrofobik	Alkil	4,94	VAL A:290
		4G4K		
Ligan Alami	Hidrogen	Konvensional	2,13	HIS A:200
	Hidrogen	Konvensional	2,37	ARG A:218
<i>β-Myrcene</i>	Hidrofobik	Pi-Alkil	4,86	HIS A:200
	Hidrofobik	Pi-Alkil	4,47	TYR A:229
<i>β-Ocimene</i>	Hidrofobik	Pi-Sigma	3,63	HIS A:200
<i>Carvacrol</i>	Hidrofobik	Pi-Pi T-Shaped	4,51	HIS A:200
	Hidrofobik	Pi-Alkil	4,54	HIS A:200
	Hidrofobik	Pi-Alkil	4,25	TYR A:229
<i>Cis-Dihydrocarvone</i>	Hidrogen	Konvensional	2,71	VAL A:232
	Hidrogen	Karbon-Hidrogen	3,58	SER A:231
	Hidrofobik	Pi-Sigma	3,97	HIS A:200
<i>Citronellal</i>	Hidrogen	Konvensional	2,50	HIS A:200
	Hidrogen	Konvensional	2,10	ARG A:218
	Hidrofobik	Pi-Alkil	5,07	HIS A:200

Tabel Lampiran 3. Jenis interaksi residu asam amino

Senyawa Aktif	Kategori Ikatan	Jenis Ikatan	Jarak Ikatan (Å)	Residu Asam Amino
<i>Limonene</i>	Hidrofobik	Pi-Alkil	4,52	HIS A:200
	Hidrofobik	Pi-Alkil	4,26	TYR A:229
<i>Linalool</i>	Hidrogen	Konvensional	2,29	HIS A:200
	Hidrofobik	Pi-Sigma	3,73	HIS A:200
<i>Neral</i>	Hidrogen	Konvensional	2,44	ARG A:218
	Hidrofobik	Pi-Alkil	4,91	HIS A:200
	Hidrofobik	Pi-Alkil	5,19	TYR A:229
<i>Nerol</i>	Hidrofobik	Pi-Alkil	5,07	HIS A:200
<i>P-Cymene</i>	Hidrofobik	Pi-Pi T-Shaped	4,71	HIS A:200
	Hidrofobik	Pi-Alkil	4,63	HIS A:200
	Hidrofobik	Pi-Alkil	4,44	TYR A:229

*Cetak tebal: Jenis interaksi residu asam amino yang serupa dengan ligan alami



Tabel Lampiran 4. Hasil prediksi profil farmakokinetik dan toksisitas senyawa aktif terpilih

Senyawa Aktif	Penyerapan Usus (%)	Penyerapan Kulit (log Kp)	Kelarutan Dalam Air (log mol/L)	Inhibitor Sitokrom P450					Hepatotoksitas	Sensitisasi Kulit	LD ₅₀ (mg/kg)
				CYP2D6	CYP3A4	CYP2C9	CYP2C19	CYP1A2			
<i>1,8-Cineol</i>	96.505	-2.437	-2.63	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	2480
<i>α-Pinene</i>	95.061	-1.852	-3.689	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	3700
<i>β-Myrcene</i>	95.544	-1.173	-4.338	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	5000
<i>β-Ocimene</i>	95.116	-1.169	-4.314	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	113
<i>β-Pinene</i>	95.431	-1.683	-4.078	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	4700
<i>Borneol</i>	92.98	-2.153	-2.477	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	500
<i>Camphene</i>	94.972	-1.473	-4.189	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	5000
<i>Camphor</i>	95.506	-1.983	-2.912	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	775
<i>Carvacrol</i>	92.402	-1.312	-2.994	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	ya	tidak	810
<i>Carvone</i>	97.216	-2.156	-2.457	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	1640
<i>Cis-Dihydrocarvone</i>	96.61	-2.113	-2.538	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	5000
<i>Citronellal</i>	95.139	-1.36	-3.495	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	2420
<i>Decanal</i>	94.394	-1.319	-4.337	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	5000
<i>Eugenol</i>	93.397	-1.88	-2.02	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	ya	ya	1930
<i>γ-Terpinene</i>	95.698	-1.557	-3.865	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	2500
<i>Geranial</i>	95.317	-2.413	-3.377	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	500
<i>Geraniol</i>	92.788	-1.511	-2.866	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	2100
<i>Heptanol</i>	92.902	-1.742	-2.105	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	1000
<i>Limonene</i>	95.408	-1.744	-3.543	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	4400
<i>Linalool</i>	92.722	-1.665	-2.668	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	2200
<i>Menthol</i>	94.717	-2.06	-2.43	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	940
<i>Neral</i>	95.317	-2.413	-3.377	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	500
<i>Nerol</i>	92.788	-1.511	-2.866	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	2100
<i>P-Cymene</i>	94.253	-1.051	-3.938	tidak	tidak	tidak	tidak	ya	tidak	ya	3
<i>Sabinene</i>	95.135	-1.348	-4.651	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	tidak	5000

LAMPIRAN II. GAMBAR LAMPIRAN

Gambar Lampiran 1. Hasil perhitungan nilai RMSD ligan alami protein 4BXI pada proses validasi protokol penambatan

```
DockRMSD Results

#####
# DockRMSD (v1.1): docking pose distance calculation      #
#                                                         #
# If you use DockRMSD in your work, please cite:         #
#                                                         #
# Bell, E.W., Zhang, Y. DockRMSD: an open-source tool for atom #
# mapping and RMSD calculation of symmetric molecules through graph #
# isomorphism. Journal of Cheminformatics, 11:40 (2019).   #
#####

Calculated Docking RMSD: 1.355

Total # of Possible Mappings: 16
Optimal mapping (First file -> Second file, * indicates correspondence is not one-to-one):
C 1 -> C 1
C 2 -> C 7 *
O 3 -> O 8 *
O 5 -> O 5
C 7 -> C 2 *
O 8 -> O 3 *
```

Gambar Lampiran 2. Hasil perhitungan nilai RMSD ligan alami protein 4G4K pada proses validasi proses protokol penambatan

```
DockRMSD Results

#####
# DockRMSD (v1.1): docking pose distance calculation      #
#                                                         #
# If you use DockRMSD in your work, please cite:         #
#                                                         #
# Bell, E.W., Zhang, Y. DockRMSD: an open-source tool for atom #
# mapping and RMSD calculation of symmetric molecules through graph #
# isomorphism. Journal of Cheminformatics, 11:40 (2019).   #
#####

Calculated Docking RMSD: 1.878

Total # of Possible Mappings: 16
Optimal mapping (First file -> Second file, * indicates correspondence is not one-to-one):
C 1 -> C 1
O 2 -> O 2
C 3 -> C 4 *
O 4 -> O 5 *
C 5 -> C 7 *
O 6 -> O 8 *
```

STUDI IN SILICO: MINYAK ATSIRI KETUMBAR (*Coriandrum sativum* L.) SEBAGAI QS-INHIBITOR DALAM PEMBENTUKAN BIOFILM *Staphylococcus aureus*

ORIGINALITY REPORT

6%

SIMILARITY INDEX

6%

INTERNET SOURCES

2%

PUBLICATIONS

1%

STUDENT PAPERS

PRIMARY SOURCES

1	etheses.uin-malang.ac.id Internet Source	1%
2	Submitted to Universitas Nasional Student Paper	1%
3	ejournals.stfm.ac.id Internet Source	1%
4	jurnal.uns.ac.id Internet Source	1%
5	jurnalnasional.ump.ac.id Internet Source	1%
6	download.garuda.ristekdikti.go.id Internet Source	<1%
7	123dok.com Internet Source	<1%
8	media.neliti.com Internet Source	<1%

riset.unisma.ac.id

Exclude quotes On

Exclude matches < 17 words

Exclude bibliography On

