

**PROPOSAL
HIBAH PENGEMBANGAN INOVASI MODUL DIGITAL
MOOC UNIVERSITAS AIRLANGGA 2022
SKEMA MATA KULIAH**

“In Silico Untuk Pemula / In Silico Docking Molekuler”



PENGUSUL :

Ketua : Dr. Siti Khaerunnisa, M.Si

Anggota :

1. Dr. Anna Surgean Veterini, dr., Sp.An., KIC
2. Yuani Setiawati, dr., M.Ked
3. Rizki Awaluddin, S.Farm., M.Biomed

UNIVERSITAS AIRLANGGA

2022

HALAMAN PENGESAHAN PROPOSAL

1. a. Nama Perguruan Tinggi : Universitas Airlangga
b. Alamat Perguruan Tinggi : Kampus A Unair. Jalan Prof Dr Moestopo 47 Surabaya
c. Nama Fakultas : Kedokteran
d. Nama Program Studi : Pendidikan Dokter
e. Judul MOOC : In Silico Untuk Pemula
f. SKS : 4
g. Semester : Ganjil
h. Skema Hibah : Mata Kuliah
2. Koordinator / Ketua
a. Nama Lengkap dan Gelar : Dr. Siti Khaerunnisa, M.Si
b. NIP/NIK/NIDN : 198804262019113201 / 0026048806
c. Golongan / Kepangkatan : IIIC / Penata
d. Jabatan Akademik : Staf Dosen
e. Alamat Email : st.khaerunnisa@fk.unair.ac.id
f. No. Telp : 081233118194
3. Biaya yang diajukan : Rp. 25.000.000,-
4. Jangka Waktu Pelaksanaan : 10 Bulan
5. Dana Pendamping : -

Mengetahui,
Dekan Fakultas Kedokteran
Universitas Airlangga

Surabaya, 29 Oktober 2021

Penanggungjawab Program (Pengusul)



Prof. Dr. Budi Santoso, dr., Sp. OG(K)
NIP. 196302171989111001

Dr. Siti Khaerunnisa, M.Si
NIP. 198804262019113201

**Pernyataan Kesanggupan Melaksanakan Program Hibah
Pengembangan Inovasi Modul Digital MOOC Unair 2022**

Yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama Lengkap : Dr. Siti Khaerunnisa, M.Si
NIP/NIK/NIDN : 198804262019113201 / 0026048806

Dengan ini menyatakan bahwa saya bersedia menyelesaikan seluruh rangkaian kegiatan dan menyampaikan laporan hasil bantuan dana sesuai ketentuan di dalam panduan. Jika kami tidak memenuhi komitmen yang sudah disepakati maka kami siap menerima sanksi dari Direktorat Inovasi dan Pengembangan Pendidikan (DIPP) Universitas Airlangga.

Demikian Surat Pernyataan ini saya buat dengan sesungguhnya. Apabila kemudian hari ditemukan ketidaksesuaian dengan pernyataan ini dan atau terdapat tuntutan dari pihak lain, saya bersedia bertanggung jawab untuk diproses sesuai dengan ketentuan yang berlaku, dan membebaskan Direktorat Inovasi dan Pengembangan Pendidikan (DIPP) Universitas Airlangga dari tuntutan apapun, serta bersedia mengembalikan seluruh biaya program bantuan dana yang saya peroleh ke Kas Negara.

Mengetahui,
Dekan Fakultas Kedokteran
Universitas Airlangga

Surabaya, 29 Oktober 2021

Penanggungjawab Program (Pengusul)



Prof. Dr. Budi Santoso, dr., Sp. OG(K)
NIP. 196302171989111001



Dr. Siti Khaerunnisa, M.Si
NIP. 198804262019113201

BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Perkembangan ilmu pengetahuan dan teknologi mendorong peneliti untuk meningkatkan kualitas hidup manusia melalui penelitian-penelitian. Pendekatan penelitian eksperimental pada umumnya dibagi menjadi tiga, yaitu *in vivo*, *in vitro* dan *in silico*. Ketiga istilah pendekatan penelitian tersebut berasal dari Bahasa Yunani, *in vivo* berarti dalam sebuah kehidupan, *in vitro* berarti dalam sebuah objek kaca, dan *in silico* berarti melalui simulasi komputer.

In vivo (dalam sebuah kehidupan) mengacu pada eksperimen yang menggunakan keseluruhan dari kehidupan organisme. Studi hewan coba dan uji klinis merupakan bentuk dari penelitian *in vivo*. Uji *in vivo* sering kali dilakukan bersamaan dengan uji *in vitro* karena lebih cocok untuk mengamati efek keseluruhan penelitian pada subjek makhluk hidup.

In vitro mengacu pada teknik penelitian dengan prosedur memberikan lingkungan yang dikendalikan yang dilakukan di luar tubuh organisme. Berbagai penelitian biologi sel dilakukan di luar organisme atau sel. Salah satu kelemahan *in vitro* adalah kegagalan mereplikasi kondisi seluler yang tepat pada organisme, khususnya mikroba.

In silico merupakan istilah untuk menggambarkan “melakukan di komputer atau melalui simulasi komputer”. Istilah *in silico* pertama kali digunakan publik pada tahun 1989 pada *workshop “Cellular Automata: Theory and Application”* di Los Alamos, New Mexico. Pedro Miramontes, seorang ahli matematika dari *National Autonomous University of Mexico*, mempresentasikan hasilnya tentang “*DNA and RNA Physiochemical Constraints, Cellular Automata and Molecular Evolution*”. Dalam pembicaraannya, Miramontes menggunakan istilah “*in silico*” untuk mengkarakterisasi penelitian biologi yang sepenuhnya menggunakan komputer.

In silico merupakan pendekatan penelitian yang penggunaannya diikuti dengan perkembangan teknologi dan informasi database yang telah tersedia. Pendekatan ini sudah sangat umum digunakan pada bidang kedokteran dan kesehatan lainnya. Meskipun studi *in silico* relatif baru, namun penggunaannya sudah sangat meluas. Ketersediaan database (DNA, RNA dan sebagainya) yang mudah diakses oleh publik yang terbuka dan gratis, memberikan peluang kepada peneliti untuk menggunakan informasi tersebut dalam pemecahan masalah medis dan pengembangan ilmu kedokteran dan kesehatan.

Sebagai contoh, studi tahun 2009 menggunakan emulasi *software* untuk memprediksikan bagaimana obat-obatan tertentu yang ada di pasaran dapat mengobati

multiple drug resistant pada tuberkulosis. Selain itu, salah satu contoh penggunaannya pada kasus wabah yang menyita perhatian dunia sejak Desember 2019 yaitu wabah *Coronavirus disease 2019 (COVID-19)* yang memicu seluruh elemen terkait untuk bergerak cepat dalam mendiagnosis dan menemukan obat yang tepat dalam pengendalian wabah ini. Penggunaan bioinformatika memberikan kontribusi dalam mengidentifikasi penyakit baru, penegakan diagnosis hingga penemuan dan pengembangan obat. Penggunaan pendekatan *in silico* ini sudah meluas namun disarankan untuk dilanjutkan ke uji atau pembuktian lebih lanjut.

1.2 Tujuan

Modul ini diperuntukkan untuk berbagai kalangan utamanya untuk pemula dalam mengenal dan membangun penelitian melalui pendekatan *in silico*.

1.3 Sasaran

Sasaran pada kegiatan ini adalah Mahasiswa Pendidikan Dokter blok elektif tahap akademik semester 7 serta seluruh jenjang Pendidikan S1, S2, S3 maupun PPDS pada bidang yang linear. Kegiatan ini dapat pula diikuti oleh peneliti maupun staf dosen yang tertarik dalam penelitian *In Silico*.

1.4 Ruang Lingkup

In silico merupakan salah satu pendekatan penelitian eksperimental selain *in vivo* (dalam sebuah kehidupan) dan *in vitro* (dalam sebuah objek kaca). *In silico* berasal dari bahasa Yunani yang berarti melalui simulasi komputer. *In silico* merupakan pendekatan relatif baru dalam penelitian, tapi mulai digunakan secara luas dalam bidang kedokteran dan kesehatan.

Penggunaan Bioinformatika kini menarik perhatian untuk memecahkan permasalahan di bidang kesehatan baik di negara maju maupun negara berkembang. Ketersediaan informasi *database* (DNA, RNA, Protein dan sebagainya) yang dapat diakses secara terbuka dan gratis pada situs *online* memberikan peluang untuk dimanfaatkan untuk pengembangan ilmu kedokteran dan pendekatan memecahkan beberapa permasalahan medis. Sebagai contoh, pandemik COVID-19 yang membutuhkan ilmu bioinformatika yang salah satunya dengan teknik *in silico* dalam mengidentifikasi hingga penemuan kandidat obat dan vaksin secara cepat untuk menangani penyakit tersebut.

BAB 2. PROSES PENGEMBANGAN

Tahapan pengembangan *Massive Open Online Course* ini diantaranya :

1. Penyusunan materi (Telah dilaksanakan membuat Buku Referensi)
2. Penyusunan Materi terbaru
3. Penyediaan software terkait
4. Pembuatan Video sebanyak 14 Video
5. Tutorial pembuatan mini project berupa manuskrip dan publikasi

Modul ini menyajikan perkuliahan dan praktikum secara kering (*In Silico*) yang menggunakan beberapa software yang akan disediakan dalam google drive yang dapat diakses oleh seluruh peserta. Segala proses instalasi dan Langkah praktikum *In Silico* akan ditayangkan dalam modul ini. Serta peserta akan diberikan materi cara membuat manuskrip dari hasil Penelitian *In Silico* yang telah dibangun. Terlampir contoh Buku Referensi yang telah disusun oleh penulis dan contoh artikel terindex scopus yang telah diterbitkan dalam modul ini.

BAB 3. RENCANA PENGGUNAAN ANGGARAN

NO	Kegiatan	Volume Kegiatan	Biaya Satuan	Jumlah (Rp.)
1	Honorarium Narasumber			
	1. Dr. Siti Khaerunnisa, M.Si	5 Video	1.250.000	6.250.000
	2. Dr. Anna Surgean Veterini, dr., SpAn., KIC	2 Video	1.000.000	2.000.000
	3. Yuani Setiawati, dr., M.Ked	2 Video	1.000.000	2.000.000
	4. Rizki Awaluddin, S.Farm., M.Biomed	5 Video	1.000.000	5.000.000
2	Honorarium Tim Ahli			
	Sunarto (Editing, Layout, Produksi)	14 Video	350.000	4.900.000
3	Penggandaan			
	Fotocopy dan Jilid	1 set	200.000	200.000
	ATK	1 set	200.000	200.000
4	Konsumsi			
	Rapat Persiapan (Makan dan Snack)	5 kali 5 orang	50.000	1.250.000
5	Transport			
	Penginapan	3 malam	400.000	1.200.000
	Transport Kereta PP	3 kali	500.000	1.500.000
	Transport Lokal	5 kali	500.000	500.000
Jumlah Keseluruhan				25.000.000,-
Terbilang : Dua Puluh Lima Juta Rupiah				

BAB 4. JADWAL PELAKSANAAN

No	2021	Materi	Dosen
1	Januari	-Pendahuluan a) Pengenalan jenis penelitian b) Pengenalan Bioinformatika c) Penggunaan sumber informasi / sumber database d) Asam Amino, Asam Nukleat & Protein	NIS
2	Januari	Pemodelan struktur & Docking Molekuler a) Penggunaan swiss model & manfaatnya b) Pengantar Docking Penemuan dan Pengembangan Obat berbasis Docking Molecular	NIS
3	Januari	Aplikasi Bioinformatika di bidang kesehatan - Anestesi / Pain	ANN
4	Januari	Aplikasi Bioinformatika di bidang kesehatan - <i>Critical care / Critically ill</i>	ANN
5	Januari	Perangkat lunak / Software Docking	NIS
6	Februari	Docking dan Analisis (1)	RIZ
7	Februari	Docking dan Analisis (2)	RIZ
8	Februari	Docking menggunakan MOE (1)	RIZ
9	Februari	Docking menggunakan MOE (2)	RIZ
10	Februari	Pengantar <i>Molecular Dynamic</i>	RIZ
11	Februari	Network Pharmacology : Mechanism of Pathway	NIS
12	Maret	Farmakokinetik -Pengolahan data <i>Swiss Adme</i>	YUN
13	Maret	Farmakodinamik -Bahan aktif herbal	YUN
14	Maret	-Penyusunan manuskrip <i>In Silico</i> Docking Molecular -Tips Publikasi Penelitian In Silico	NIS

Keterangan :

NIS = Siti Khaerunnisa (Departemen Biokimia Kedokteran FK Unair)

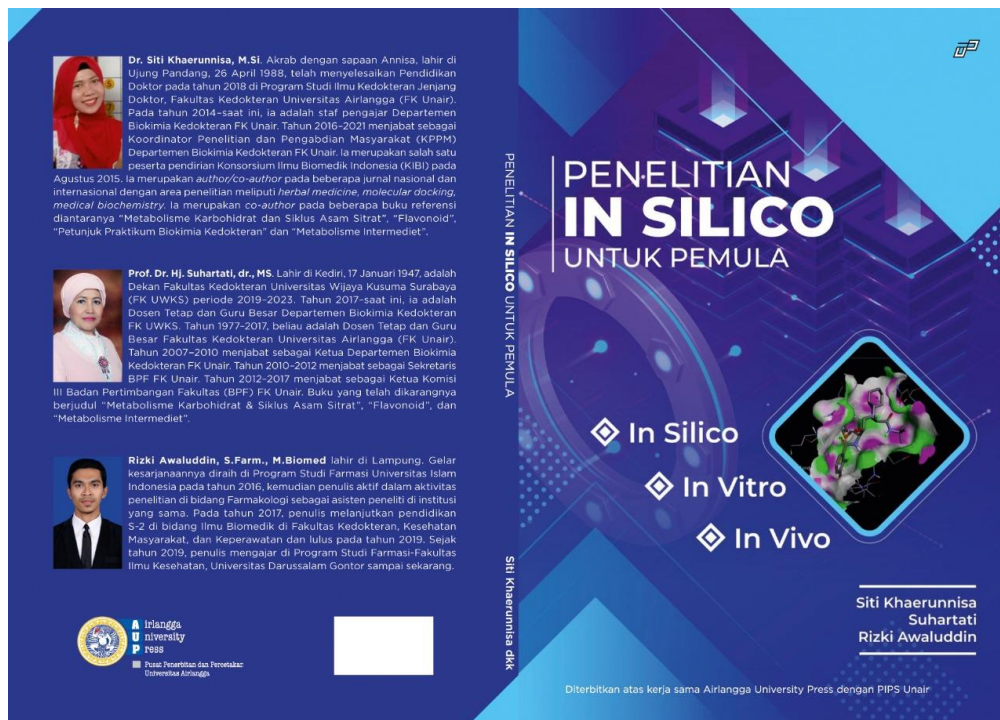
ANN = Anna Surgean Veterini (Departemen Anestesiologi dan Reanimasi, RSUD Dr. Soetomo-FK Unair)

YUN = Yuani Setiawati (Departemen Farmakologi FK Unair)

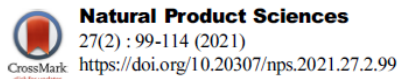
RIZ = Rizki Awaluddin (Departemen Farmasi, Fakultas Ilmu Kesehatan, Universitas Darussalam Gontor, Ponorogo)

Lampiran

1. Buku Referensi



2. Contoh Publikasi Jurnal Yang dihasilkan



In Silico Analysis of Potential Antidiabetic Phytochemicals from *Matricaria chamomilla* L. against PTP1B and Aldose Reductase for Type 2 Diabetes Mellitus and its Complications

Arisvia Sukma Hariftyani¹, Lady Aqnes Kurniawati¹, Siti Khaerunnisa^{2*}, Anna Surgean Veterini³, Yuani Setiawati⁴, and Rizki Awaluddin⁵

¹Faculty of Medicine, Universitas Airlangga, Surabaya, Indonesia

²Department of Physiology and Medical Biochemistry, Faculty of Medicine, Universitas Airlangga, Surabaya, Indonesia

³Department of Anesthesiology and Intensive Care, Faculty of Medicine, Universitas Airlangga – Dr. Soetomo General Hospital, Surabaya, Indonesia

⁴Department of Anatomy-Histology and Pharmacology, Faculty of Medicine, Universitas Airlangga, Surabaya, Indonesia

⁵Department of Pharmacy, Faculty of Health Science, University of Darussalam Gontor, Ponorogo, Indonesia

Abstract – Type 2 diabetes mellitus (T2DM) and its complications are important noncommunicable diseases with high mortality rates. Protein tyrosine phosphatase 1B (PTP1B) and aldose reductase inhibitors are recently approached and advanced for T2DM and its complications therapy. *Matricaria chamomilla* L. is acknowledged as a worldwide medicinal herb that has many beneficial health effects as well as antidiabetic effects. Our research

Molecular Docking Human Plasma Kallikrein to Prevent Acute Respiratory Distress Syndrome(ARDS) in COVID-19 Patient

**Feriawan Tan¹, Cindy ApriliaEkaPrasanty¹, Anna Surgean Veterini², YuaniSetiawati³, Rizki Awaluddin⁴,
Fadilah Fadilah⁵, Siti Khaerunnisa⁶**

¹*Student, Faculty of Medicine, Airlangga University, Surabaya, East Java 60132, Indonesia,* ²*Lecturer, Department of Anesthesiology and Reanimation, General Hospital Dr.Soetomo-Faculty of Medicine, Airlangga University, Surabaya, East Java 60132, Indonesia,* ³*Lecturer, Department of Anatomy Histology and Pharmacology, Faculty of Medicine, Airlangga University, Surabaya, East Java 60132, Indonesia,* ⁴*Lecturer, Department of Pharmacy, Faculty of Health Science, University of Darussalam Gontor; Ponorogo, East Java 63471, Indonesia,* ⁵*Lecturer, Department of Medicinal Chemistry, Faculty of Medicine, University of Indonesia, Central Jakarta, Jakarta 10430, Indonesia,* ⁶*Lecturer, Department of Physiology and Medical Biochemistry, Faculty of Medicine, Airlangga University, Surabaya, East Java 60132, Indonesia*

Abstract

SARS CoV-2 infection causes various clinical manifestations ranging from mild to severe. Acute Respiratory Distress Syndrome (ARDS) is a severe complication of COVID-19 caused by activation of the kallikrein-