

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN.....	iii
ABSTRAK	iv
ABSTRAK.....	v
KATA PENGANTAR.....	vi
UCAPAN TERIMA KASIH	vii
DAFTAR ISI.....	x
BAB 1 PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Masalah.....	1
1.2 Rumusan Masalah	6
1.3 Definisi Operasional.....	6
1.4 Tujuan Penelitian	8
1.5 Manfaat Penelitian	9
1.5.1 Kegunaan Teoritis	9
1.5.2 Kegunaan Praktis	9
BAB 2 TINJAUAN TEORITIS	10
2.1 Kajian Pustaka.....	10
2.1.1 <i>Clitoria ternatea</i> L.	10
2.1.2 Morfologis dan Klasifikasi <i>Clitoria ternatea</i> L.	11
2.1.3 Kandungan Kimia <i>Clitoria ternatea</i> L.	12
2.1.4 Hipertensi	13
2.1.5 Faktor Risiko	14
2.1.6 Patofisiologi Hipertensi.....	17
2.1.7 Tatalaksana Hipertensi	18
2.1.8 Obat Pembanding <i>Lisinopril</i>	20
2.1.9 Analisis <i>In Silico</i>	20
2.1.10 <i>Molecular Docking</i>	21
2.1.10.1 Reseptor ACE (<i>Angiotensin Converting Enzyme</i>)	22
2.1.10.2 Ligan	23
2.1.11 <i>Lipinski's Rule of Five</i>	23
2.1.12 Prediksi Fisikokimia	24
2.1.13 Prediksi Farmakokinetik	24
2.1.14 Prediksi Toksisitas	25
2.1.15 Interaksi Obat dan Binding Site	25
2.1.16 Aplikasi Penunjang	26
2.1.16.1 <i>AutoDock Tools 1.5.7</i>	26
2.1.16.2 <i>Biovia Discovery Studio Visualizer 2021</i>	27
2.1.16.3 <i>pkCSM Online Tool</i>	27
2.1.16.4 <i>ProTox Online Tool</i>	28

2.1.16.5 ERRAT <i>Online Tool</i>	28
2.1.17 Implikasi dalam Pendidikan	29
2.2 Hasil Penelitian yang Relevan	31
2.3 Kerangka Konseptual	32
2.4 Pertanyaan Penelitian	35
BAB 3 PROSEDUR PENELITIAN.....	36
3.1 Metode Penelitian.....	36
3.2 Ruang Lingkup Penelitian (Fokus Penelitian)	36
3.3 Sumber Data Penelitian.....	36
3.4 Langkah-Langkah Penelitian	37
3.4.1 Alat dan Bahan.....	37
3.4.2 Tahap Pencarian dan Pengunduhan Ligan	37
3.4.3 Tahap Pencarian dan Pengunduhan Reseptor	41
3.4.4 Tahap Preparasi Ligan.....	42
3.4.5 Tahap Preparasi Reseptor.....	42
3.4.6 Tahap Penentuan Grid Box	43
3.4.7 Tahap Pembuatan Notepad	43
3.4.8 Tahap Docking Ligan dan Reseptor.....	44
3.4.9 Tahap Visualisasi Hasil Docking	45
3.4.10 Tahap Prediksi Fisikokimia dan Farmakokinetik (ADME).....	46
3.4.11 Tahap Prediksi Toksisitas	48
3.5 Teknik Pengumpulan Data	49
3.6 Teknik Analisis Data.....	49
3.7 Waktu dan Tempat Penelitian	51
BAB 4 HASIL DAN PEMBAHASAN.....	53
4.1 Penelusuran Ligan Senyawa Uji	53
4.2 Preparasi Struktur Ligan	54
4.3 Prediksi Sifat Fisikokimia.....	56
4.4 Prediksi Sifat Farmakokinetik.....	58
4.5 Prediksi Sifat Toksisitas	65
4.6 Pengunduhan Reseptor Target	67
4.7 Uji Validitas Reseptor Target.....	68
4.8 Preparasi Reseptor Target	69
4.9 Hasil Penentuan Grid Box (Autogrid).....	70
4.10 <i>Molecular Docking</i> Senyawa Uji dan Senyawa Kontrol terhadap Reseptor 1O86.....	71
4.10.1 Hasil <i>Molecular Docking</i> Senyawa Uji dan Senyawa Kontrol terhadap Reseptor 1O86.....	71
4.10.2 Visualisasi Hasil <i>Molecular Docking</i> Senyawa Uji dan Senyawa Kontrol terhadap Reseptor 1O86.....	73

4.11 Implikasi dalam Pendidikan	78
BAB 5 SIMPULAN DAN SARAN.....	81
5.1 Simpulan	81
5.2 Saran.....	82
DAFTAR PUSTAKA	83
LAMPIRAN.....	94
RIWAYAT HIDUP	110

DAFTAR TABEL

Tabel 3. 1 Jadwal Kegiatan Penelitian	52
Tabel 4. 1 Senyawa Aktif dalam Bunga Telang (<i>Clitoria ternatea</i> L.)	53
Tabel 4. 2 Senyawa Uji dan Senyawa Pembanding Lisinopril	54
Tabel 4. 3 Daftar Ligan Senyawa Uji.....	55
Tabel 4. 4 Daftar Ligan Senyawa Uji.....	54
Tabel 4. 5 Hasil Prediksi sifat Fisikokimia Menggunakan pkCSM Online Tool .	56
Tabel 4. 6 Hasil Prediksi Sifat Farmakokinetik	58
Tabel 4. 7 Hasil Prediksi Toksisitas	66
Tabel 4. 8 Koordinat Grid Box pada Molecular Docking.....	70
Tabel 4. 9 Hasil Molecular Docking Senyawa Uji dan Senyawa Kontrol dengan Reseptor 1O86.....	71
Tabel 4. 10 Visualisasi Hasil Interaksi Ligan Uji dengan Reseptor 1O86	74
Tabel 4. 11 Hasil Interaksi Asam Amino dalam Ikatan Hidrogen dan Storik pada Reseptor 1O86.....	75

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Tanaman Bunga telang (<i>Clitoria ternatea</i> L.).....	10
Gambar 2.2 Morfologi bagian-bagian bunga telang (<i>Clitoria ternatea</i> L.) (A) bunga (B) buah dan biji (C) daun dan (D) akar	12
Gambar 2.3 Struktur lisinopril	20
Gambar 2.4 Aplikasi AutoDock Tool 1.5.7	27
Gambar 2.5 Aplikasi Biovia Discovery Visualizer 2021	27
Gambar 2.6 Aplikasi web server pkCSM Online Tool	28
Gambar 2.7 Aplikasi web server ProTox Online Tool	28
Gambar 2.8 Aplikasi ERRAT Online Tool.....	29
Gambar 2.9 Kerangka Konseptual Penelitian	34
Gambar 3.1 Tampilan awal KNAPSAck.....	38
Gambar 3.2 Kolom pencarian senyawa di KNAPSAck.....	38
Gambar 3.3 Tampilan hasil senyawa aktif <i>Clitoria ternatea</i> L. di KNAPSAck....	38
Gambar 3.4 Tampilan awal PubChem	39
Gambar 3.5 Kolom pencarian ligan di PubChem	39
Gambar 3.6 Tampilan hasil pencarian ligan di PubChem	40
Gambar 3.7 Tampilan hasil pencarian Delphinidin 3-(6''-malonyglucoside) di PubChem	40
Gambar 3.8 Tampilan pengunduhan Delphinidin 3-(6''-malonyglucoside) di PubChem.....	40
Gambar 3.9. Tampilan awal RSCB PDB	41
Gambar 3.10 Pencarian reseptor 1O86 di RSCB PDB	41
Gambar 3.11 Tampilan download file reseptor 1O86 di RSCB	42
Gambar 3.12 Tampilan notepad untuk docking	43
Gambar 3.13 Tampilan command prompt	44
Gambar 3.14 Tampilan setelah enter di Command Prompt.....	44
Gambar 3.15 Proses docking di Command Prompt.....	44
Gambar 3.16 Tampilan setelah selesai docking di Command Prompt	45
Gambar 3.17 Menu Ligand Interactions di Biovia Discovery Studio Visualizer 2021	45
Gambar 3.18 Menu Show 2D Diagram di Biovia Discovery Visualizer 2021	46
Gambar 3.19 Tampilan hasil visualisasi di Biovia Discovery Visualizer 2021....	46
Gambar 3.20 Tampilan pkCSM	46
Gambar 3.21 Tampilan kolom kode dan file SMILE di pkCSM.....	47
Gambar 3.22 Hasil pencarian menggunakan kode SMILE.....	47
Gambar 3.23 Tampilan hasil dari molecule properties di pkCSM.....	47
Gambar 3.24 Tampilan dari Protox.....	48
Gambar 3.25 Tampilan awal dari Tox Prediction	48
Gambar 3.26 Kolom pencarian Tox Prediction	48
Gambar 3.27 Tampilan untuk melakukan prediksi toksisitas	49

Gambar 3.28 Hasil prediksi toksisitas.....	49
Gambar 4.1 Struktur kristal Human Angiotensin Converting Enzyme (ACE) in complex with lisinopril (1O86).....	67
Gambar 4.2 Informasi Reseptor ACE.....	68
Gambar 4.3. Hasil Validasi Protein 1O86.....	68
Gambar 4.4 Reseptor sebelum di preparasi (a) dan (b) Sesudah di preparasi	69
Gambar 4.5 Hasil preparasi reseptor 1O86 yang sudah diberikan muatan hidrogen	70
Gambar 4. 6 Desain dan Laman e-book Implikasi dalam Pendidikan.....	80

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Hasil uji Fisikokimia	94
Lampiran 2 Hasil Uji Farmakokinetik	95
Lampiran 3 Hasil Uji Toksisitas	96
Lampiran 4 Hasil Molecular Docking.....	98
Lampiran 5 SK Dosen Pembimbing Skripsi	99
Lampiran 6 Usulan Judul Skripsi ke Dosen Pembimbing	100
Lampiran 7 Usulan Judul Skripsi ke DBS	101
Lampiran 8 Kartu Bimbingan Proposal Bersama Dosen Pembimbing 1.....	102
Lampiran 9 Kartu Bimbingan Proposal Bersama Dosen Pembimbing 2.....	103
Lampiran 10 Rekomendasi Revisi Seminar proposal	104
Lampiran 11 Kartu Bimbingan Skripsi Bersama Dosen Pembimbing 1	105
Lampiran 12 Kartu Bimbingan Skripsi Bersama Dosen Pembimbing 2	106
Lampiran 13 Bukti Submit Artikel	107
Lampiran 14 Rekomendasi Revisi Seminar Hasil	108
Lampiran 15 Keterangan Revisi Skripsi	109