

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN	ii
LEMBAR PERTAHANAN	iii
PERNYATAAN	iv
ABSTRAK	v
ABSTRACT	vi
KATA PENGANTAR	vii
UCAPAN TERIMA KASIH	viii
DAFTAR ISI	x
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR GAMBAR	xiv
DAFTAR LAMPIRAN	xvi
BAB 1	1
PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	6
1.3 Definisi Operasional.....	6
1.4 Tujuan Penelitian.....	10
1.5 Kegunaan Penelitian.....	10
BAB 2	12
TINJAUAN TEORITIS	12
2.1 Kajian Pustaka.....	12
2.1.1 Pengujian <i>In Silico</i>	12
2.1.2 Identifikasi Senyawa Metabolit Sekunder menggunakan <i>Gas Chromatography-Mass Spectrometry</i> (GC-MS).....	14
2.1.3 <i>Python Prescription</i> (PyRx)	15
2.1.4 Biovia Discovery Studio 2025	16
2.1.5 <i>Database</i>	16
2.1.6 Penilaian Kualitas Protein	18
2.1.7 Penilaian Kelayakan Senyawa sebagai Kandidat Obat.....	19
2.1.8 Kanker Ovarium.....	22

2.1.9 Purwoceng (<i>Pimpinella pruatjan</i> Molk.).....	23
2.1.10 <i>Poly (ADP-ribose) polymerase 2</i> (PARP2).....	26
2.1.11 Bioinformatika dalam Pendidikan.....	27
2.1.12 Sumber Belajar Biologi.....	28
2.2 Hasil Penelitian yang Relevan	29
2.3 Kerangka Konseptual.....	30
2.4 Pertanyaan Penelitian	32
BAB 3	34
PROSEDUR PENELITIAN.....	34
3.1 Metode Penelitian.....	34
3.2 Ruang Lingkup Penelitian.....	34
3.3 Sumber Data Penelitian.....	35
3.4 Langkah-Langkah Penelitian	35
3.4.1 Alat dan Bahan	35
3.4.2 Identifikasi Senyawa Metabolit Sekunder Tanaman Purwoceng menggunakan GC-MS.....	37
3.4.3 Pengunduhan Berkas Ligan Uji dan Ligan Kontrol.....	38
3.4.4 Pengunduhan Berkas Reseptor.....	40
3.4.5 Tahap Pemodelan Reseptor	42
3.4.6 Tahap Validasi Reseptor	44
3.4.7 Preparasi Ligan dan Reseptor.....	46
3.4.8 Tahap Simulasi <i>Molecular Docking</i> , Ligan Uji, dan Ligan Kontrol terhadap Reseptor.....	50
3.4.9 Tahap Visualisasi Hasil <i>Docking</i>	54
3.4.10 Tahap Analisis Sifat Fisikokimia.....	56
3.4.11 Tahap Analisis Sifat Farmakokinetik	58
3.4.12 Tahap Analisis Toksisitas	60
3.5 Teknik Pengumpulan Data	62
3.6 Teknik Analisis Data	62
3.7 Waktu dan Tempat Penelitian.....	63
BAB 4	65

HASIL DAN PEMBAHASAN	65
4.1 Deskripsi Hasil Penelitian	65
4.1.1 Hasil Analisis Senyawa Metabolit Sekunder Purwoceng	65
4.1.2 Pencarian dan Pengunduhan Ligan Uji, Ligan Kontrol, dan Reseptor	66
4.1.3 Pemodelan dan Validasi Reseptor	67
4.1.4 Preparasi Ligan Uji, Ligan Kontrol, dan Reseptor.....	68
4.1.5 Hasil <i>Molecular Docking</i>	69
4.1.6. Hasil Analisis Sifat Fisikokimia.....	74
4.1.7 Hasil Analisis Sifat Farmakokinetik	74
4.1.8 Hasil Analisis Toksisitas	77
4.2 Pembahasan.....	78
4.3 Sumber Belajar Biologi.....	88
BAB 5	90
SIMPULAN DAN SARAN.....	91
5.1 Simpulan	91
5.2 Saran.....	92
DAFTAR PUSTAKA.....	94
LAMPIRAN.....	108
RIWAYAT HIDUP.....	128

DAFTAR TABEL

Tabel 3.1 Alat Penelitian.....	35
Tabel 3.2 Bahan Penelitian	36
Tabel 3.3 Jadwal Kegiatan Penelitian.....	64
Tabel 4.1 Hasil Uji GC-MS Tanaman Purwoceng.....	65
Tabel 4.2 Identitas Ligan Uji	66
Tabel 4.3 Identitas Ligan kontrol.....	65
Tabel 4.4 Identitas Reseptor	67
Tabel 4.5 Hasil <i>Molecular Docking</i>	70
Tabel 4.6 Hasil Interaksi Ligan Uji, Ligan Kontrol dengan Reseptor.....	72
Tabel 4.7 Hasil Analisis Sifat Fisikokimia	74
Tabel 4.8 Hasil Analisis Sifat Farmakokinetik	76
Tabel 4.9 Hasil Analisis Sifat Toksisitas.....	77

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1.1 Cuplikan Isi <i>Booklet</i>	9
Gambar 2.1 Morfologi Tanaman Purwoceng	25
Gambar 2.2 Kerangka Konseptual Penelitian.....	32
Gambar 3.1 Tampilan Web PubChem	38
Gambar 3.2 Kolom Pencarian PubChem.....	38
Gambar 3.3 Hasil Pencarian Ligan.....	39
Gambar 3.4 Informasi Ligan	39
Gambar 3.5 <i>Download</i> Struktur 3D Ligan	40
Gambar 3.6 Tampilan Web RCSB PDB	40
Gambar 3.7 Kolom Pencarian RCSB PDB	41
Gambar 3.8 Informasi Reseptor.....	41
Gambar 3.9 <i>Download</i> Berkas Reseptor	42
Gambar 3.10 Tampilan Web SWISS-MODEL.....	42
Gambar 3.11 Halaman Pemodelan Reseptor	43
Gambar 3.12 Proses Pemodelan Reseptor	43
Gambar 3.13 Hasil Pemodelan Reseptor	44
Gambar 3.14 <i>Download</i> Hasil Pemodelan	44
Gambar 3.15 Tampilan Web SAVES	45
Gambar 3.16 Proses Validasi Reseptor	45
Gambar 3.17 Tampilan Daftar Program Validasi.....	46
Gambar 3.18 ERRAT <i>Score</i>	46
Gambar 3.19 Pengunggahan Ligan	47
Gambar 3.20 Minimisasi Energi.....	47
Gambar 3.21 Konversi File Ligan menjadi Format (.pdbqt).....	48
Gambar 3.22 Penyimpanan Hasil Preparasi Ligan	48
Gambar 3.23 Pengunggahan Reseptor.....	49
Gambar 3.24 Pembersihan Struktur Reseptor	49
Gambar 3.25 Penyimpanan Hasil Preparasi Reseptor	50
Gambar 3.26 Pengunggahan Berkas Preparasi Ligan dan Reseptor.....	51
Gambar 3.27 <i>Make Ligand</i>	51

Gambar 3.28 <i>Make Macromolecule</i>	52
Gambar 3.29 Pemilihan Molekul dalam Fitur Vina Wizard sebelum.....	52
Gambar 3.30 <i>Proses Docking</i>	53
Gambar 3.31 Hasil dan Penyimpanan <i>Docking</i>	54
Gambar 3.32 Pengunggahan File Ligan Hasil <i>Docking</i> dan Reseptor	54
Gambar 3.33 Penggabungan Ligan Hasil <i>Docking</i> dan Reseptor dalam.....	55
Gambar 3.34 <i>Define Ligand</i>	55
Gambar 3.35 Visualisasi 3D	56
Gambar 3.36 Visualisasi 2D	56
Gambar 3.37 Proses Analisis Sifat Fisikokimia	57
Gambar 3.38 Hasil Analisis Sifat Fisikokimia	58
Gambar 3.39 Proses Analisis Farmakokinetik.....	58
Gambar 3.40 Hasil Analisis Farmakokinetik.....	59
Gambar 3.41 Tampilan Web ProTox 3.0	60
Gambar 3.42 Input Nama Senyawa dan SMILES pada ProTox 3.0.....	60
Gambar 3.43 Jenis Analisis Toksisitas.....	61
Gambar 3.44 Hasil Analisis Toksisitas	61
Gambar 3.45 (a) LPPT UGM; (b) Laboratorium Botani Universitas Siliwangi .	63
Gambar 4.1 Hasil Pemodelan dan Validasi Reseptor	68
Gambar 4.2 Hasil Preparasi Ligan dan Reseptor.....	69

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Hasil <i>Molecular Docking</i>	108
Lampiran 2 Hasil Analisis Sifat Fisikokimia	110
Lampiran 3 Hasil Analisis Sifat Farmakokinetik	112
Lampiran 4 Hasil Analisis Sifat Toksisitas.....	114
Lampiran 5 Surat Keputusan Pembimbing	116
Lampiran 6 Lembar Persetujuan Judul oleh Dosen Pembimbing	117
Lampiran 7 Lembar Persetujuan Judul oleh Dewan Bimbingan Skripsi (DBS).....	118
Lampiran 8 Kartu Bimbingan Proposal (Pembimbing 1)	119
Lampiran 9 Kartu Bimbingan Proposal (Pembimbing 2)	120
Lampiran 10 Keterangan Revisi Proposal.....	121
Lampiran 11 Kartu Bimbingan Seminar Hasil (Pembimbing 1).....	122
Lampiran 12 Kartu Bimbingan Seminar Hasil (Pembimbing 2).....	123
Lampiran 13 Keterangan Revisi Seminar Hasil	124
Lampiran 14 Kartu Bimbingan Skripsi (Pembimbing 1).....	125
Lampiran 15 Kartu Bimbingan Skripsi (Pembimbing 2).....	126
Lampiran 16 Keterangan Revisi Skripsi	127