

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN	i
LEMBAR PERTAHANAN	iii
LEMBAR PERNYATAAN	iii
ABSTRAK	iv
ABSTRACT	v
KATA PENGANTAR.....	vii
UCAPAN TERIMA KASIH	vii
DAFTAR ISI.....	ix
DAFTAR TABEL	xi
DAFTAR GAMBAR.....	xii
DAFTAR LAMPIRAN	xiii
BAB 1 PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Masalah	1
1.2 Rumusan Masalah	4
1.3 Definisi Operasional.....	5
1.3.1 Analisis <i>In Silico</i>	5
1.3.2 Senyawa Metabolit Sekunder Daun Harendong	5
1.3.3 Inhibitor Tuberkulosis	6
1.3.4 Suplemen Bahan Ajar Biologi.....	7
1.4 Tujuan Penelitian.....	7
1.5 Kegunaan Penelitian.....	7
BAB 2 TINJAUAN TEORITIS.....	9
2.1 Kajian Pustaka	9
2.1.1 Harendong (<i>Melastoma malabathricum</i>)	9
2.1.2 Tuberkulosis	15
2.1.3 Pengujian <i>In Silico</i>	18
2.1.4 Suplemen Bahan Ajar.....	20
2.2 Hasil Penelitian yang Relevan.....	21
2.3 Kerangka Konseptual.....	22
2.4 Pertanyaan Penelitian.....	23

BAB 3 PROSEDUR PENELITIAN.....	24
3.1 Metode Penelitian.....	24
3.2 Ruang Lingkup Penelitian	24
3.3 Sumber Data Penelitian.....	25
3.4 Langkah-langkah Penelitian	25
3.5 Teknik Pengumpulan Data	31
3.6 Teknik Analisis Data.....	32
3.7 Waktu dan Tempat Penelitian	32
BAB 4 HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN	34
4.1 Deskripsi Temuan Penelitian	34
4.1.1 Senyawa Metabolit Sekunder Daun Harendong	34
4.1.2 Pengunduhan Berkas Senyawa Uji dan Kontrol	34
4.1.3 Pengunduhan Berkas Reseptor InhA.....	35
4.1.4 Validasi Reseptor InhA menggunakan Uji Errat.....	36
4.1.5 Preparasi Ligan dan Reseptor	36
4.1.6 <i>Molecular Docking</i> dan Visualisasinya.....	39
4.1.7 Analisis Fisikokimia dan Farmakokinetik.....	48
4.1.8 Analisis Tingkat Toksisitas	52
4.2 Pembahasan.....	55
4.2.1 Nilai Afinitas Ligan Uji terhadap Reseptor InhA	56
4.2.2 Interaksi Senyawa Uji dengan Asam Amino Protein Target InhA	59
4.2.3 Analisis Fisikokimia dan Farmakokinetik Senyawa Uji	63
4.2.4 Analisis Toksisitas Senyawa Uji	68
4.2.5 Analisis Integratif Penentuan Senyawa Kandidat Terbaik.....	71
4.3 Suplemen Bahan Ajar Biologi.....	73
BAB 5 SIMPULAN DAN SARAN	74
5.1 Simpulan	74
5.2 Saran	75
DAFTAR PUSTAKA.....	76
LAMPIRAN.....	87

DAFTAR TABEL

Tabel 2. 1. Klasifikasi Harendong (<i>Melastoma malabathricum</i>).....	11
Tabel 2. 2. Senyawa Metabolit Sekunder pada Daun Harendong (<i>Melastoma malabathricum</i>) dari Beberapa Referensi Utama.....	13
Tabel 3. 1. Alat dan Bahan Penelitian	26
Tabel 3. 2. Jadwal Penelitian	33
Tabel 4. 1. Senyawa Metabolit Sekunder Daun Harendong	34
Tabel 4. 2. Data Senyawa Uji dan Kontrol.....	34
Tabel 4. 3. Data Reseptor InhA	35
Tabel 4. 4. Hasil Molecular Docking Reseptor dengan Ligan Uji dan Kontrol...	39
Tabel 4. 5. Jenis Interaksi dan Residu Asam Amino Hasil Docking	48
Tabel 4. 6. Hasil Analisis Fisikokimia dan Farmakokinetik	50
Tabel 4. 7. Hasil Analisis Toksisitas	52
Tabel 4. 8. Rangkuman Potensi Setiap Senyawa Uji Berdasarkan 4 Parameter ..	71

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1. Morfologi Harendong	11
Gambar 2. 2. Siklus Hidup <i>Mycobacterium tuberculosis</i>	17
Gambar 2. 3. Asam Mikolat pada Dinding Sel <i>M. tuberculosis</i>	18
Gambar 2. 4. Kerangka Konseptual Penelitian.....	23
Gambar 3. 1. website Pubchem.	28
Gambar 3. 2. website RCSB PDB	28
Gambar 3. 3. (A) <i>Website</i> SwissMODEL; (B) <i>Website</i> Uji Errat	29
Gambar 3. 4. Website SwissADME	31
Gambar 3. 5. Website Protox 3.0.....	31
Gambar 4. 1. Hasil validasi Reseptor InhA	36
Gambar 4. 2. Hasil Preparasi Ligan.....	38
Gambar 4. 3. Struktur 3D Reseptor	39
Gambar 4. 4. Visualisasi 3D hasil docking	45
Gambar 4. 5. Visualisasi 2D Interaksi Ligan dengan Reseptor.....	47
Gambar 4. 6 <i>Booklet</i> : A) <i>Cover</i> ; B) <i>Barcode</i>	73

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Hasil <i>Molecular Docking</i>	87
Lampiran 2. Hasil Uji Fisikokimia dan Farmakokinetik.....	89
Lampiran 3. Hasil Uji Toksisitas.....	96
Lampiran 4. Usulan Judul	103
Lampiran 5. Surat Pernyataan Judul	104
Lampiran 6. Keterangan Revisi Proposal.....	104
Lampiran 7. Keterangan Revisi Hasil Penelitian	104
Lampiran 8. Keterangan Revisi Skripsi	104