

ABSTRAK

NURUL APWA. 2026. **STUDI *IN SILICO* SENYAWA METABOLIT SEKUNDER KULIT PISANG RANGGAP (*Musa troglodytarum* L.) SEBAGAI KANDIDAT ANTIOKSIDAN UNTUK SUMBER BELAJAR BIOLOGI.** Jurusan Pendidikan Biologi, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Siliwangi, Tasikmalaya.

Penelitian ini bertujuan mengidentifikasi dan mengevaluasi potensi flavonoid kulit pisang ranggap (*Musa troglodytarum* L.), limbah tanaman endemik Indonesia, sebagai kandidat antioksidan melalui inhibisi protein Keap1 secara *in silico*, serta mengembangkan hasilnya sebagai sumber belajar. Analisis LC-MS mengidentifikasi 80 puncak metabolit, yang setelah penapisan menghasilkan 14 senyawa flavonoid unik dari subkelas flavonol, flavon, flavanon, flavanol, pterocarpan, dan leucoanthocyanidin, dengan Kaempferol sebagai komponen paling melimpah. Validasi PASS Online menunjukkan seluruh ligan aktif sebagai antioksidan dengan nilai $P_a > 0,7$. Simulasi *molecular docking* terhadap Keap1 menunjukkan energi ikatan kuat (-9,2 hingga -11,5 kcal/mol), di mana Kaempferol-7-rhamnoside 4'-glucoside (K7RG) mencatatkan afinitas tertinggi (-11,5 kcal/mol), melampaui ligan kontrol 1VV (-10,6 kcal/mol), melalui inhibisi kompetitif pada residu kunci Ser46, Asn97, Arg98, dan Ala239. Evaluasi ADMET menunjukkan dualisme profil kelayakan oral. Secara konvensional, Trifolol menunjukkan profil farmakokinetik terbaik karena nihil pelanggaran Lipinski dan nilai HIA tertinggi (98,08%). Namun, integrasi perspektif biotransformasi mikrobiota kolon mengungkap bahwa senyawa glikosida besar seperti K7RG dan Luteolin-7-glucoside (L7G) justru sangat potensial secara *in vivo* karena terhidrolisis menjadi aglikon aktif (Kaempferol dan Luteolin) yang bebas pelanggaran fisikokimia dengan afinitas superior. Mayoritas senyawa berada pada kelas toksisitas rendah (Kelas 5-6) tanpa efek neurotoksisitas maupun hepatotoksitas. Penelitian ini membuktikan bahwa flavonoid kulit pisang ranggap layak sebagai kandidat antioksidan alami berbasis mekanisme Keap1-Nrf2-ARE melalui efek sinergis multikomponen yang memerlukan validasi *in vitro* dan *in vivo*. Sebagai implikasi edukatif, hasil penelitian ini dikembangkan menjadi media pembelajaran berupa booklet digital sebagai sumber belajar biologi berbasis riset pada materi bioteknologi modern SMA fase F dan mata kuliah Bioinformatika.

Kata Kunci: antioksidan, flavonoid, Keap1-Nrf2-ARE, *molecular docking*, pisang ranggap

ABSTRACT

NURUL APWA. 2026. **IN SILICO STUDY OF SECONDARY METABOLITE COMPOUNDS FROM RANGGAP BANANA PEEL (*Musa troglodytarum* L.) AS ANTIOXIDANT CANDIDATES FOR BIOLOGY LEARNING RESOURCES.** Department of Biology Education, Faculty of Teacher Training and Education, Universitas Siliwangi, Tasikmalaya.

This study aims to identify and evaluate the potential of flavonoids from ranggap banana (*Musa troglodytarum* L.) peel, an endemic Indonesian plant waste, as antioxidant candidates via Keap1 protein inhibition *in silico*, and to develop the results as a learning resource. LC-MS analysis identified 80 metabolite peaks, and screening yielded 14 unique flavonoid compounds, with Kaempferol as the most abundant component. PASS Online validation confirmed all ligands are active as antioxidants with $Pa > 0.7$. Molecular docking against Keap1 demonstrated strong binding energies (-9.2 to -11.5 kcal/mol). Kaempferol-7-rhamnoside 4'-glucoside (K7RG) recorded the highest affinity (-11.5 kcal/mol), surpassing the control ligand 1VV (-10.6 kcal/mol), through competitive inhibition at Ser46, Asn97, Arg98, and Ala239. ADMET evaluation revealed a dualism in oral feasibility profiles. Conventionally, Trifoliol exhibited the best pharmacokinetic profile with zero Lipinski violations and the highest HIA value (98.08%). However, integrating the colonic microbiota biotransformation perspective revealed that large glycoside compounds like K7RG and Luteolin-7-glucoside (L7G) are highly potential *in vivo*. They hydrolyze into active aglycones (Kaempferol and Luteolin) which are free from physicochemical violations with superior affinities. Most compounds fall into low toxicity classes (Class 5-6) lacking neurotoxicity or hepatotoxicity. This study proves that ranggap banana peel flavonoids are viable natural antioxidant candidates based on the Keap1-Nrf2-ARE mechanism through multicomponent synergistic effects, requiring *in vitro* and *in vivo* validation. Educationally, the findings were developed into a digital booklet as a research-based biology learning resource for Phase F high school modern biotechnology and bioinformatics courses.

Keywords: antioxidant, flavonoid, Keap1-Nrf2-ARE, molecular docking, ranggap banana