

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN	i
LEMBAR PERTAHANAN	ii
LEMBAR PERNYATAAN KEASLIAN KARYA ILMIAH	iii
ABSTRAK	iv
ABSTRACT	v
KATA PENGANTAR.....	vi
UCAPAN TERIMA KASIH.....	vii
DAFTAR ISI.....	x
DAFTAR TABEL.....	xiii
DAFTAR GAMBAR.....	xv
DAFTAR LAMPIRAN	xvii
BAB 1 PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Masalah.....	1
1.2 Rumusan Masalah	8
1.3 Definisi Operasional.....	8
1.3.1 <i>In Silico</i>	9
1.3.2 Senyawa Metabolit Sekunder Kulit Pisang Ranggap.....	9
1.3.3 Kandidat Antioksidan.....	10
1.3.4 Sumber Belajar Biologi.....	10
1.4 Tujuan Penelitian.....	11
1.5 Kegunaan Penelitian.....	11
1.5.1 Kegunaan Teoritis	11
1.5.2 Kegunaan Praktis.....	12
BAB 2 TINJAUAN TEORITIS	14
2.1 Kajian Pustaka.....	14
2.1.1 Tinjauan Umum Pisang Ranggap (<i>Musa troglodytarum</i> L.).....	14
2.1.2 Stres Oksidatif dan Radikal Bebas	21

2.1.3	Antioksidan	24
2.1.4	Identifikasi Senyawa Metabolit Sekunder.....	28
2.1.5	Studi <i>In Silico</i> dalam Penemuan Obat.....	29
2.1.6	Sumber Belajar Biologi.....	33
2.2	Hasil Penelitian yang Relevan.....	36
2.3	Kerangka Konseptual	37
2.4	Pertanyaan Penelitian	41
BAB 3 PROSEDUR PENELITIAN.....		42
3.1	Metode Penelitian.....	42
3.2	Ruang Lingkup Penelitian.....	43
3.3	Sumber Data Penelitian.....	44
3.4	Langkah-langkah Penelitian.....	44
3.4.1	Alat dan Bahan Penelitian.....	44
3.4.2	Analisis Data LC-MS dan Penentuan Senyawa Kandidat Antioksidan	46
3.4.3	Tahap Pencarian dan Pengunduhan Ligan	51
3.4.4	Tahap Validasi Aktivitas Biologis Ligan	52
3.4.5	Tahap Pencarian dan Pengunduhan Reseptor	54
3.4.6	Tahap Pemodelan Reseptor (Protein Target)	55
3.4.7	Tahap Validasi Reseptor (Protein Target).....	57
3.4.8	Tahap Preparasi Ligan dan Reseptor.....	58
3.4.9	Tahap Analisis Sifat Fisikokimia	61
3.4.10	Tahap Analisis Sifat Farmakokinetik.....	62
3.4.11	Tahap Analisis Prediksi Toksisitas	64
3.4.12	Tahap <i>Molecular Docking</i> Ligan dan Reseptor	66
3.4.13	Tahap Visualisasi Hasil <i>Docking</i>	67
3.5	Teknik Pengumpulan Data	69
3.6	Teknik Analisis Data.....	71
3.7	Waktu dan Tempat Penelitian	75
3.7.1	Waktu Penelitian	75

3.7.2	Tempat Penelitian.....	78
BAB 4 HASIL DAN PEMBAHASAN		79
4.1.	Deskripsi Temuan Penelitian	79
4.1.1	Hasil Identifikasi dan Profil Senyawa Uji	79
4.1.2	Hasil Prediksi Aktivitas Biologis (<i>Biological Activity Spectrum</i>).....	80
4.1.3	Hasil Identifikasi Struktur Reseptor (Protein Target)	83
4.1.4	Hasil Pemodelan dan Validasi Struktur Reseptor (Protein Target).....	83
4.1.5	Hasil Preparasi Ligan dan Reseptor	85
4.1.6	Hasil Analisis Sifat Fisikokimia dan <i>Drug-likeness</i>	88
4.1.7	Hasil Analisis Profil Farmakokinetik (ADME)	90
4.1.8	Hasil Analisis Prediksi Toksisitas	93
4.1.9	Hasil Simulasi <i>Molecular Docking</i>	96
4.1.10	Hasil Analisis Visualisasi Interaksi Molekuler	99
4.2.	Pembahasan.....	111
4.2.1	Kelayakan Farmakokinetik dan Sifat Fisikokimia Senyawa Flavonoid sebagai Kandidat Obat Oral	115
4.2.2	Profil Toksisitas dan Keamanan Senyawa Uji Dibandingkan Ligan Kontrol	119
4.2.3	Evaluasi Kekuatan Ikatan (<i>Binding Affinity</i>) Senyawa Flavonoid terhadap Reseptor Keap1	122
4.2.4	Analisis Visualisasi Interaksi Molekuler.....	124
4.2.5	Mekanisme Penghambatan Keap1 dan Aktivasi Pertahanan Seluler Antioksidan	127
4.2.6	Profil Komparatif Komprehensif dan Urutan Kelayakan Senyawa Kandidat Antioksidan	129
4.2.7	<i>Booklet</i> sebagai Sumber Belajar Biologi Berbasis Temuan <i>In Silico</i>	132
BAB 5 SIMPULAN DAN SARAN.....		135
5.1	Simpulan.....	135
5.2	Saran.....	136
DAFTAR PUSTAKA.....		138