

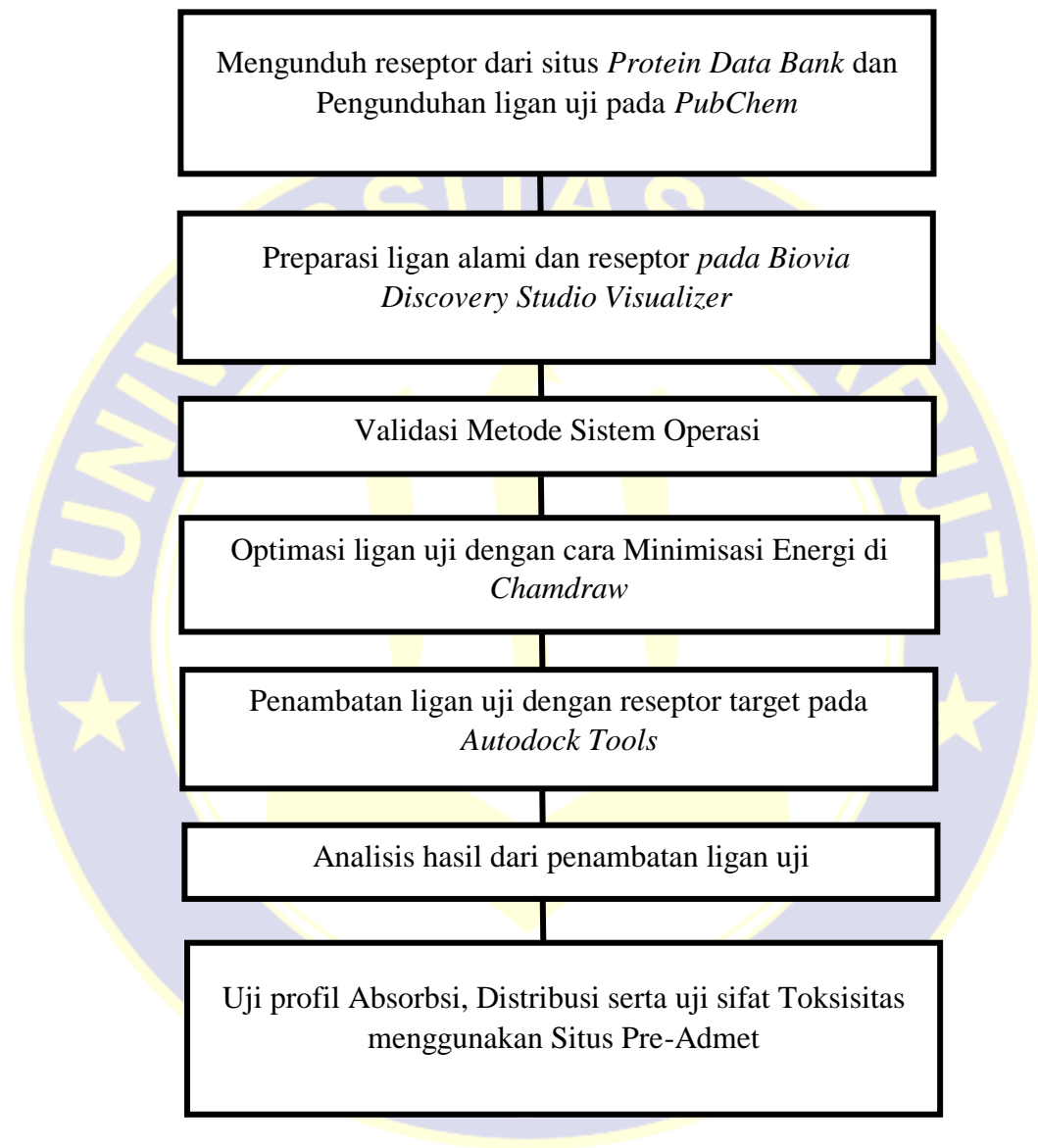
DAFTAR PUSTAKA

1. WHO. *Global Tuberculosis.*; 2017.
2. Ward JP., Ward J, Leach RM, Wiener CM. *At a Galance Sistem Respirasi.*; 2006.
3. Anggoro A. Potensi Daun Pepaya (*Carica papaya Sp .*) Sebagai Obat Anti Tuberculosis. 2015;2(2):86-89.
4. Ruswanto. 192 desain dan studi interaksi senyawa n' - (3,5-dinitrobenzoyl) - isonicotinohydrazide pada mycobacterium tuberculosis enoyl-acyl carrier protein reductase (inha). 2014;12(1):192-193.
5. Setiawan h, irawan mi. Kajian pendekatan penempatan ligan pada protein menggunakan algoritma genetika. 2017;6(2):1-6.
6. Aprillia e, tjitraesmi a. Review: uji aktivitas tumbuhan sebagai anti-tuberculosis. *Farmaka*. 2018;16(2):517-524.
7. Yogiraj v, goyal pk, chauhan cs. *Carica papaya linn : an overview. Int j herb med.* 2014;2(5):1-3.
8. Muhlisah f. *Tanaman obat keluarga*. Jakarta: penebar swadaya; 2006.
9. Price sa, wilson lm. *Patofisiologi konsep klinis proses-proses penyakit*. 2nd ed. Jakarta: egc; 1991.
10. Rubenstein d, wayne d, bradley j. *Kedokteran klinis*. (rahmalia a, ed.). Jakarta: erlangga; 2003.
11. Irianti t, kuswandi, yasin nm, kusumaningtyas ra. *Mengenal anti-tuberculosis*. Yogyakarta; 2016.
12. Harvey ra, champe pc. *Farmakologi*. 4th ed. Jakarta: egc; 2013.
13. Radji M, Biomed M. *Mekanisme Aksi Molekuler Antibiotik Dan Kemoterapi.*; 2015.
14. Brooks GF, Butel JS, Morse SA. *Mikrobiolodi Kedokteran*. 1st ed. Jakarta: Salemba Medika; 2005.
15. Indah M. *Infodatin Tuberculosis*. (Kurniasih N, ed.). Jakarta Selatan: Kementrian Kesehatan RI; 2018.

16. Siregar MIT. Mekanisme Resistensi Isoniazid & Mutasi Gen katg Ser315Thr (G944C) Mycobacterium tuberculosis Sebagai Penyebab tersering resistensi Isoniazid. 2015;3(2):1-2.
17. Patrick gl. *An introduction medicinal chemistry*. Fifth. Uk: oxford university; 2013.
18. William j. *Dasyatnya enzim*. (indri, ed.). Klik publising; 2011.
19. Wadsworth. *Fessenden & fessenden kimia organik*. 3rd ed. Jakarta: erlangga; 1986.
20. Syakuri s. *Kimia dasar 3*. Bandung: itb; 1999.
21. Brady je. *Kimia universitas asas & struktur*. 5 jilid 1. Jakarta: abinaputra aksara; 1999.
22. Achmad h, tupamahu ms. *Struktur atom, struktur molekul & sistem periodik*. Pt. Citra adiya bakti; 1992.
23. *Belajar praktis kimia*. Yogyakarta: lembijar neutron; 2016.
24. Prasetiawati R, Permana B, Soni D, Agung SN. Molecular docking study of xanthone derivative compounds of mangosteen rind (garcinia mangostana l.) To $\text{er-}\alpha$ (estrogen receptor alfa) and $\text{er-}\beta$ (estrogen receptor beta) as anti-breastcancer. *J ilm farmakobahari*. 2019;10(1):45-50.
25. PDB. Reseptir inha. [Http://www.rscb.org](http://www.rscb.org).
26. Pubchem. Senyawa aktif. [Http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov](http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov).
27. Autodock. [Http://autodock.scripps.edu/](http://autodock.scripps.edu/).
28. Nursamsiar, Alprida TT, Akbar A. 2016. Studi in silico senyawa turunan Analog kalkon dan pirimidin sebagai antiinflamasi: Prediksi absorpsi, Distribusi, dan toksisitas. *Pharmacy Vol.13 No. 01 Juli 2016*. ISSN: 1693 3591

LAMPIRAN 1

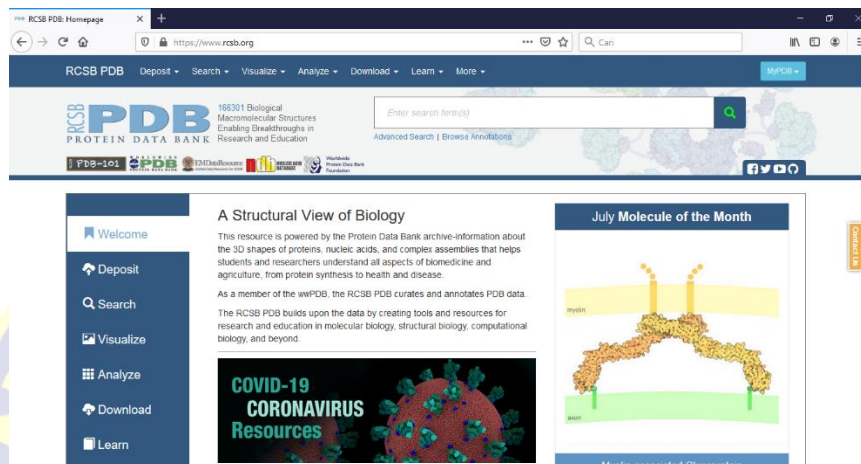
ALUR PENELITIAN PENAMBATAN MOLEKUL, PREDIKSI SIFAT FARMAKOKINETIKA DAN PREDIKSI TOKSISITAS



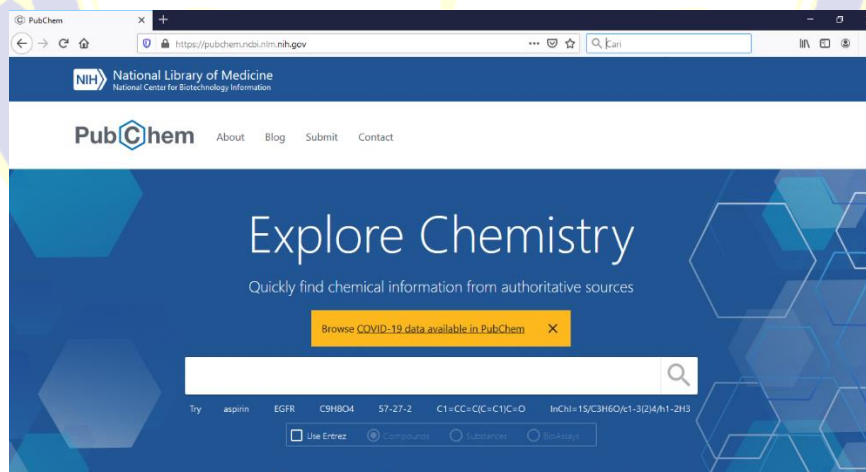
Gambar V.1 Alur penelitian penambatan molekul, prediksi sifat farmakokinetika dan prediksi toksisitas

LAMPIRAN 2

SITUS DAN APLIKASI



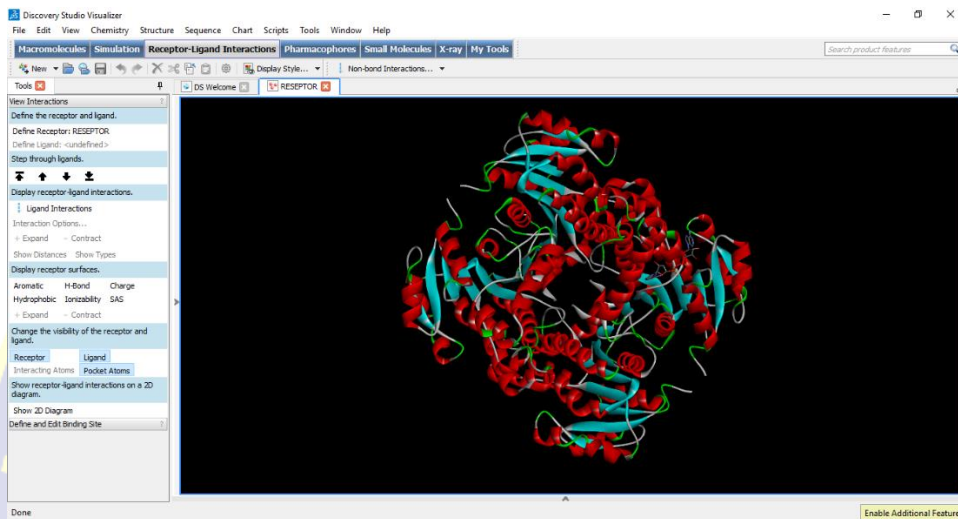
Gambar V.2 Tampilan situs *Protein Data Bank*



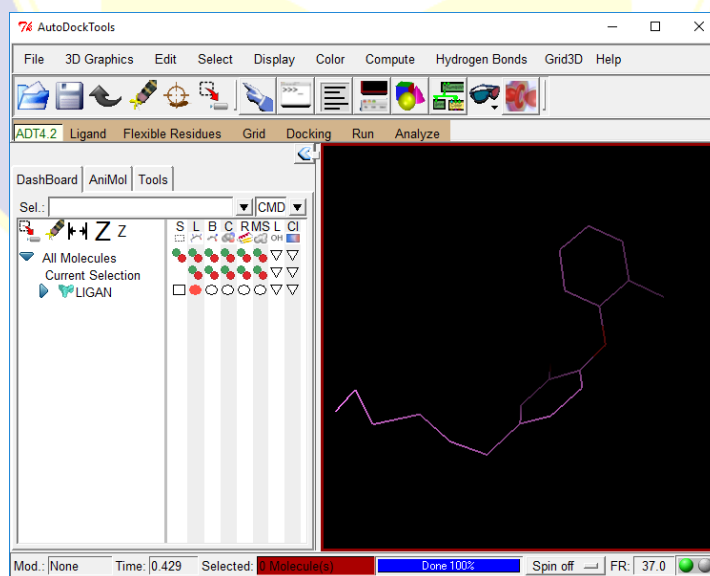
Gambar V.3 Tampilan situs *PubChem*

LAMPIRAN 2 (LANJUTAN)

SITUS DAN APLIKASI



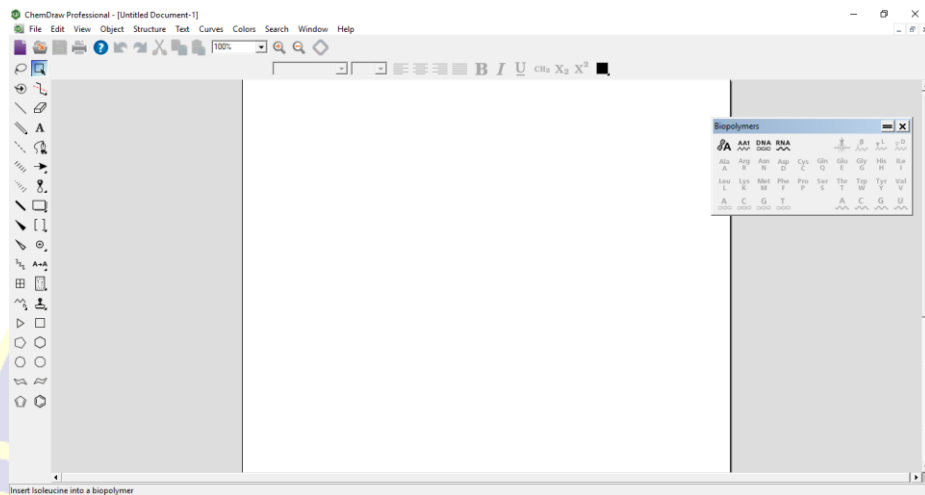
Gambar V.4 Tampilan Aplikasi *Biovia Discovery Studio Visualizer*



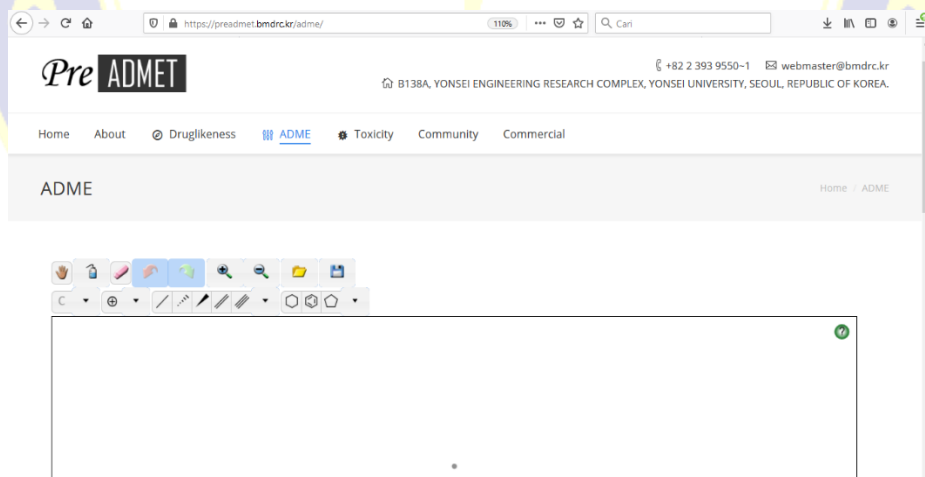
Gambar V.5 Tampilan Aplikasi *AutoDock Tools*

LAMPIRAN 2 (LANJUTAN)

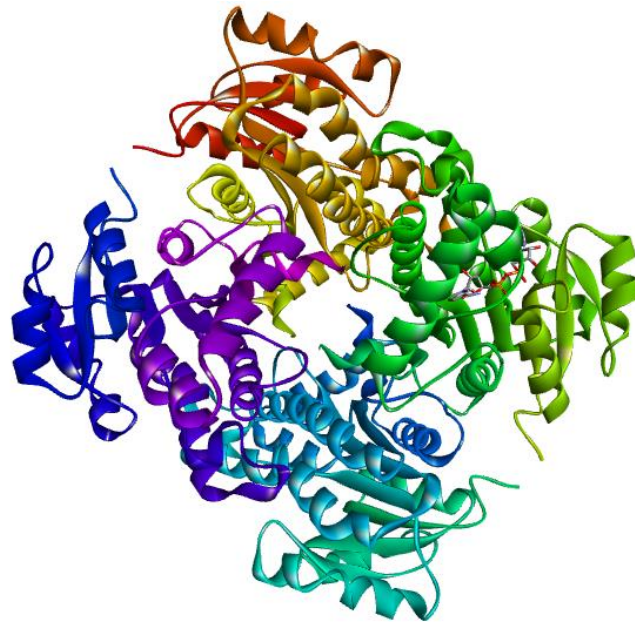
SITUS DAN APLIKASI



Gambar V.6 Tampilan Aplikasi *ChamDraw*

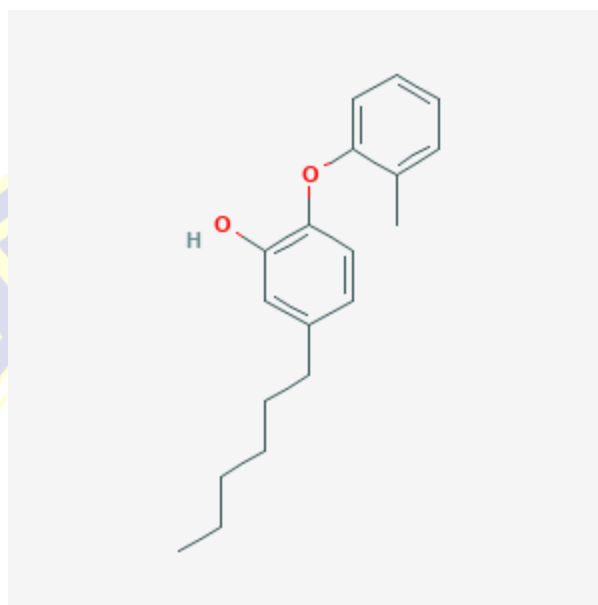


Gambar V.7 Tampilan situs *PreAdmet*

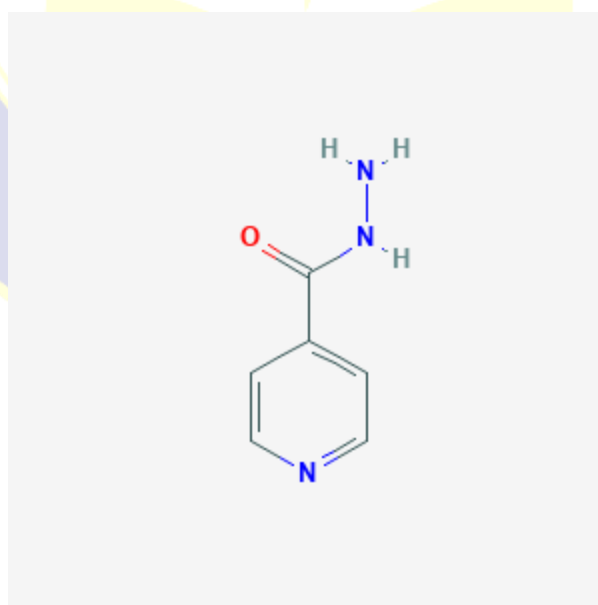
LAMPIRAN 3**RESEPTOR**

Gambar V.8 Reseptor InhA (*enoylacyl-acyl carrier protein (ACP) reductase*)

UNIGA

LAMPIRAN 4**LIGAN**

Gambar V. 9 Ligan Alami TCU (5-hexyl-2-(2-methylphenoxy)phenol)

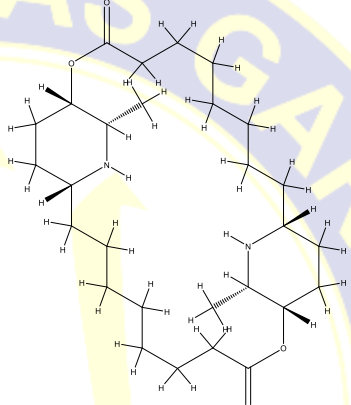
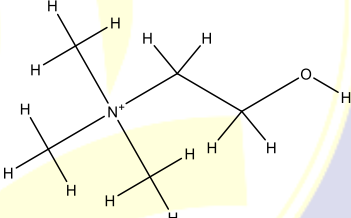
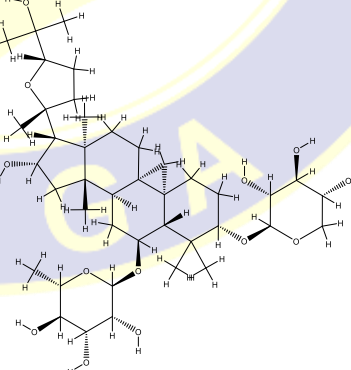


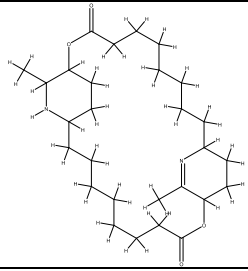
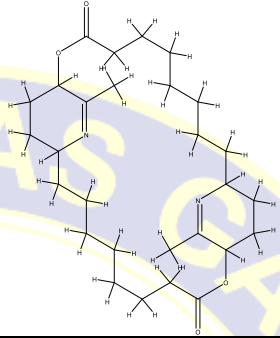
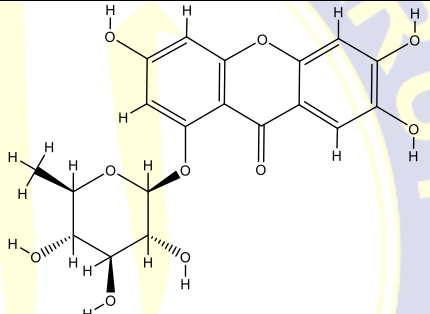
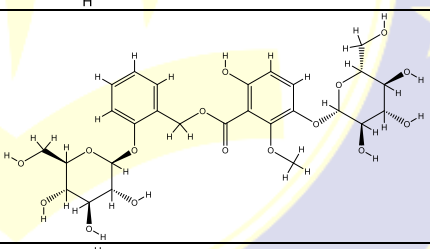
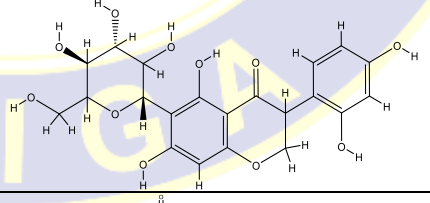
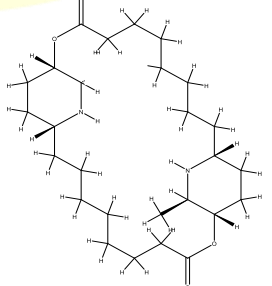
Gambar V.10 Ligan Pembanding Isoniazida

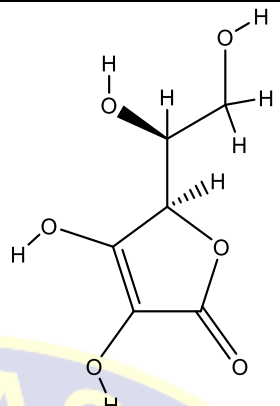
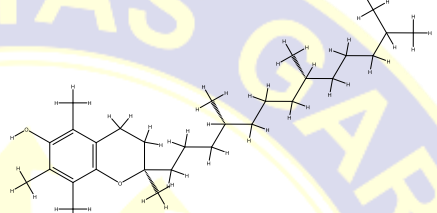
LAMPIRAN 4 (LANJUTAN)

LIGAN

Tabel V.1
Struktur 2D Senyawa Aktif Yang Terkandung Dalam Daun Pepaya (*Carica papaya L.*)

No.	Nama Senyawa	Struktur 2D
1.	Carpaine	
2.	Choline	
3.	Cyclocarposide	

4.	Dehydrocarpaine I	
5.	Dehydrocarpaine II	
6.	Gymnocarposide	
7.	Leiocarposide	
8.	Macrocarposide	
9.	Pseudocarpaine	

10.	Vit. C (Asam Askorbat)	 <chem>O=C1OC(=C(O)O)C(O)C1O</chem>
11.	Vit. E (Tokoferol)	 <chem>CCCC(C)(C)CCCC(C)(C)CCCC(C)(C)CCCC(C)(C)C1C(C)C(O)C2=CC=CC=C12</chem>

LAMPIRAN 5

SIFAT FISIKOKIMIA BERDASARKAN ATURAN LIPINSKI'S
RULE OF FIVE

Tabel V.2

Sifat Fisikokimia Senyawa Aktif Yang Terkandung Dalam Daun Pepaya (*Carica papaya L.*)

Senyawa	Berat Molekul (gr/mol)	Log P	Donor Ikatan Hidrogen	Akseptor Ikatan Hidrogen	Keterangan
Carpaine	487,7	6,3	2	6	Tidak Memenuhi Syarat
Choline	104,17	-0,4	1	1	Memenuhi Syarat
Cyclocarposide	769	1,8	8	13	Tidak Memenuhi Syarat
Dehydrocarpaine I	476,7	6	1	6	Tidak Memenuhi Syarat
Dehydrocarpaine II	474,7	5,7	0	6	Tidak Memenuhi Syarat
Gymnocarposide	406,3	0,2	6	10	Tidak Memenuhi Syarat
Leiocarposide	614,5	-0,9	9	16	Tidak Memenuhi Syarat
Macrocarposide	450,4	-0,3	8	11	Tidak Memenuhi Syarat
Pseudocarpaine	487,7	6,3	2	6	Tidak Memenuhi Syarat
Vit. C (Asam Askorbat)	176,12	-1,6	4	6	Memenuhi Syarat
Vit. E (Tokoferol)	430,7	10,7	1	2	Tidak Memenuhi Syarat

LAMPIRAN 6

VALIDASI METODE SISTEM OPERASI

Tabel V.3

Hasil Validasi Metode Sistem Operasi Pada Reseptor InhA (*enoylacyl-acyl carrier protein (ACP) reductase*)

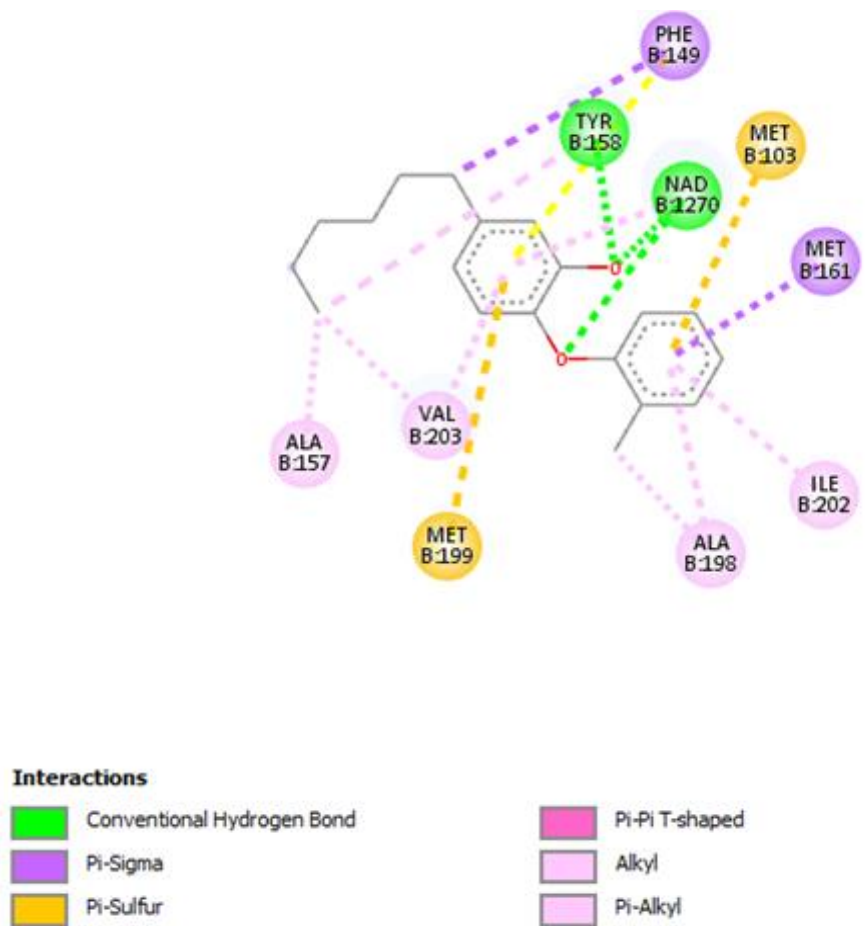
Kxde PDB	Grid Box	RSMD	ΔG (kcal/mol)	KI (nM)
2X23	X : -5.899 Y : -13.481 Z : -3.266	0,7493 Å	-10.56	11,12



Gambar VI. 11 Visualisasi Tumpang Tindih Ligan Alami 2X23
Sebelum Penambatan (merah-abu-abu)
Setelah Penembatan (kuning)

LAMPIRAN 6 (LANJUTAN)

VALIDASI METODE SISTEM OPERASI



Gambar V. 12 Interaksi Ligan Alami (TCU) dengan Residu Asam Amino pada Reseptor InhA

LAMPIRAN 7

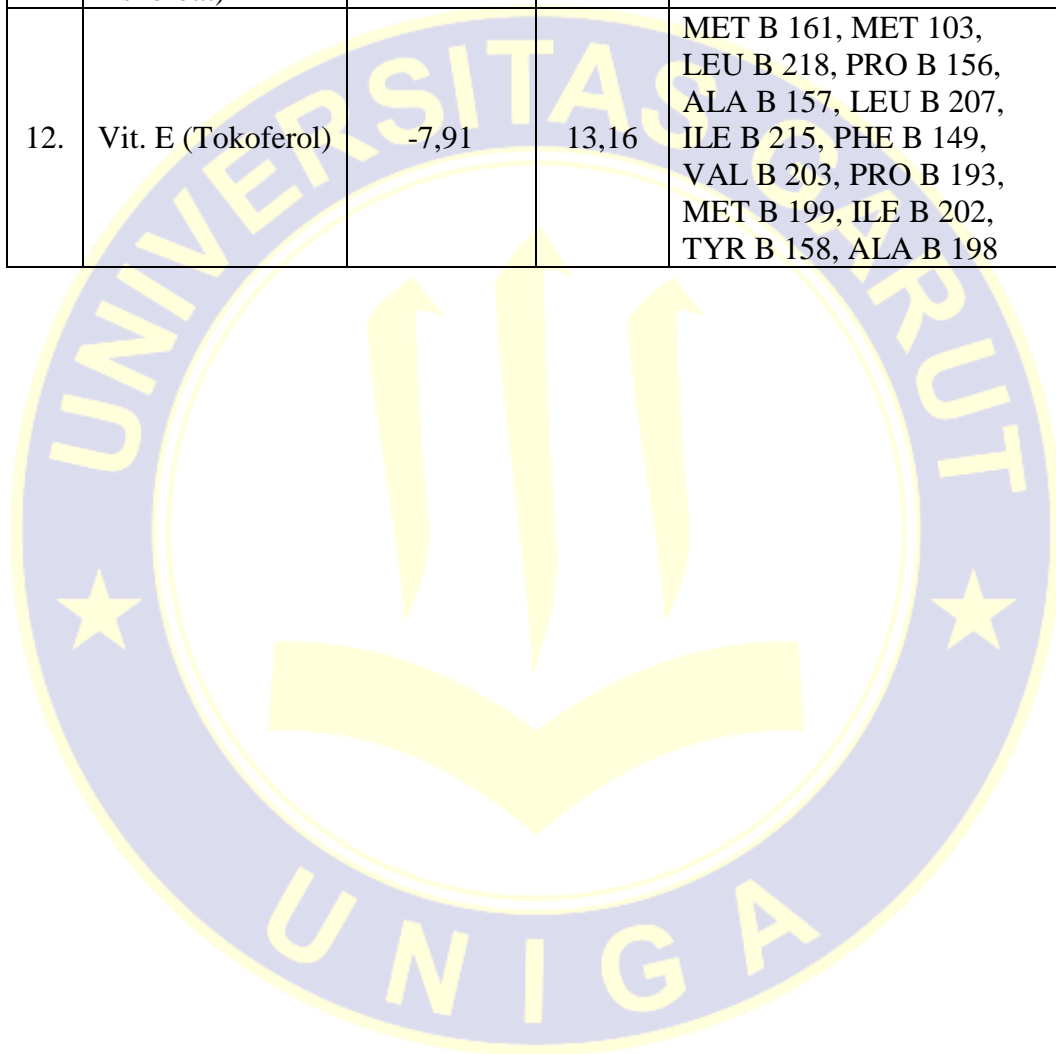
PENAMBATAN MOLEKUL LIGAN PEMBANDING DAN SENYAWA UJI

Tabel V.4

Hasil Penambatan Molekul Senyawa Uji Pada Reseptor InhA (*enoylacyl-acyl carrier protein (ACP) reductase*)

No.	Nama Senyawa	ΔG (kkal/mol)	KI (nM)	Residu Asam Amino
1.	Isoniazida (Ligan Pembanding)	-5,19	132,05	TYR B 158, VAL B 203, PHE B 149, MET B 199
2.	Carpaine	+241.59	-	MET B 155, ALA B 157, PRO B 156, VAL B 203, MET B 103, ILE B 202, MET B 161, PHE B 149, LEU B 218, TYR B 158
3.	Choline	-3,56	2,21	PHE B 149
4.	Cyclocarposide	+130.62	-	ILE B 202, MET B 161, VAL B 203, TYR B 158, MET B 199, LEU B 218, ILE B 194, PRO B 193, PHE B 149, ALA B 198, MET B 98
5.	Dehydrocarpaine I	+196.12	-	ALA B 157, LEU B 207, MET B 199, MET B 103, ILE B 202, TYR B 157, MET B 161, ALA B 198, PHE B 149, ILE B 215, LEU B 218
6.	Dehydrocarpaine II	+103.40	-	PHE B 97, ILE B 202, MET B 161, VAL B 203, MET B 199, LEU B 218, TYR B 158, MET 103, ALA 198
7.	Gymnocarposide	-7,61	1,35	MET B 155, PRO B 156, PRO B 193, ALA B 198, MET B 199, PHE B 149, VAL B 203, LEU B 218, ILE B 215
8.	Leiocarposide	+10.62	784,70	ALA B 198, TYR B 258, PHE B 249, MET B 199, LEU B 218, PRO B 193, MET B 155

9.	Macrocarposide	-3,94	441,05	MET B 161, ALA B 198, MET B 199, VAL B 203
10.	Pseudocarpaine	+116.31	-	PRO B 156, ALA B 257, LEU B 207, VAL B 203, MET B 103, ILE 202, ALA B 198, TYR 156, MET B 161, LEU B 218
11.	Vit. C (Asam Askorbat)	-3,91	409,24	-
12.	Vit. E (Tokoferol)	-7,91	13,16	MET B 161, MET 103, LEU B 218, PRO B 156, ALA B 157, LEU B 207, ILE B 215, PHE B 149, VAL B 203, PRO B 193, MET B 199, ILE B 202, TYR B 158, ALA B 198



LAMPIRAN 8

**PREDIKSI SIFAT FARMAKOKINETIKA LIGAN
PEMBANDING DAN SENYAWA UJI**

Tabel V.5

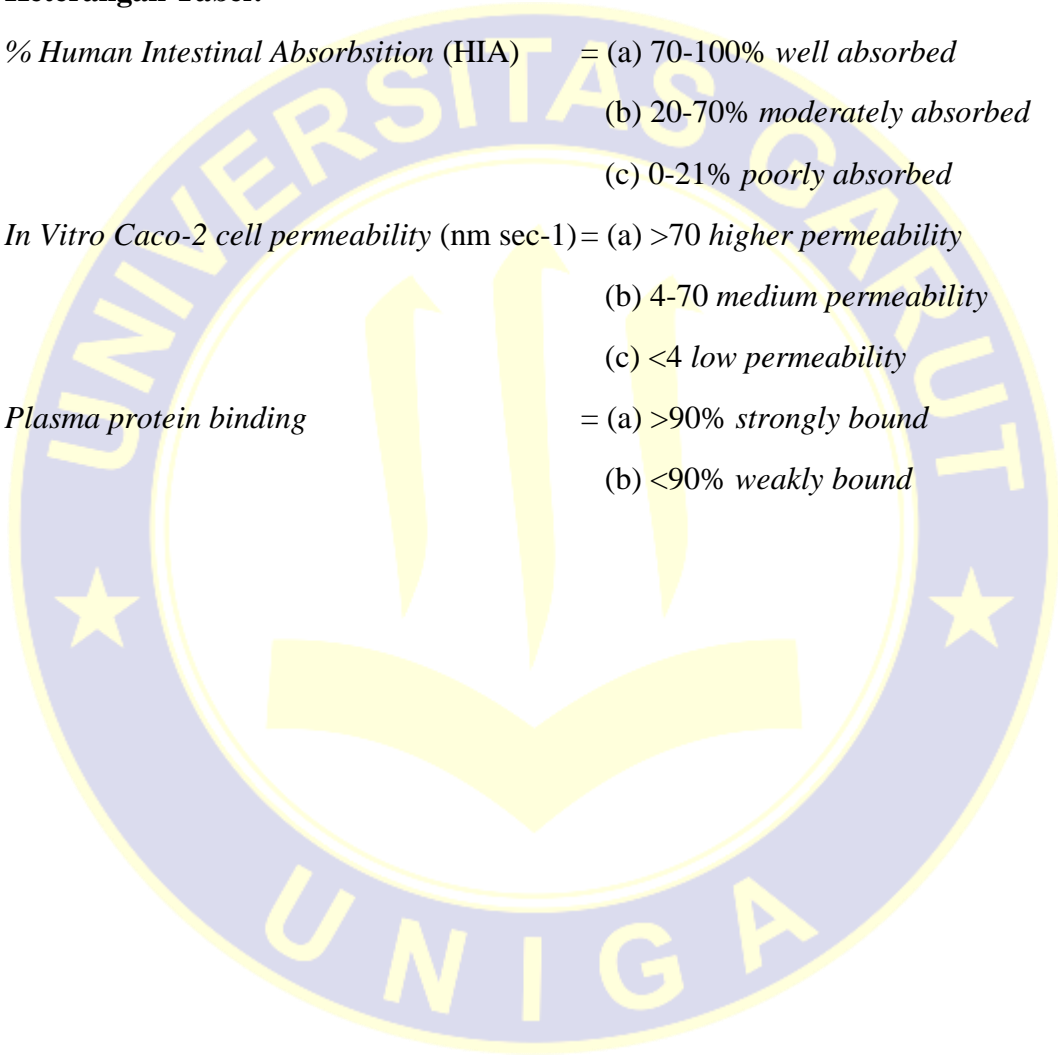
Hasil Prediksi Sifat Farmakokinetika Ligan Pembanding dan Senyawa Uji Pada
Reseptor InhA (*enoylacyl-carrier protein (ACP) reductase*)

No.	Senyawa	Absorpsi		Distribusi
		HIA (%)	CACO-2 cell (nm sec ⁻¹)	Plasma Protein Binding (%)
1.	Isoniazida (Ligan Pembanding)	87.105533 ^a	19.4963 ^b	1.607435 ^b
2.	Carpaine	94.357713 ^a	44.9038 ^b	75.435097 ^b
3.	Choline	100.000000 ^a	23.3193 ^b	79.397001 ^b
4.	Cyclocarposide	20.913748 ^b	13.624 ^b	42.183371 ^b
5.	Dehydrocarpaine I	94.625837 ^a	48.3345 ^b	80.016756 ^b
6.	Dehydrocarpaine II	97.787834 ^a	53.8992 ^b	93.271310 ^a
7.	Gymnocarposide	28.782600 ^b	9.60392 ^b	37.813172 ^b
8.	Leiocarposide	4.047340 ^c	8.21855 ^b	34.672954 ^b
9.	Macrocarposide	12.870723 ^c	5.62498 ^b	53.090762 ^b
10.	Pseudocarpaine	94.625837 ^a	48.3345 ^b	80.016756 ^b
11.	Vit. C (Asam Askorbat)	33.157259 ^b	2.48366 ^c	5.303528 ^b
12.	Vit. E (Tokoferol)	97.729890 ^a	38.2636 ^b	100.000000 ^a

**LAMPIRAN 8
(LANJUTAN)**

**PREDIKSI SIFAT FARMAKOKINEIKA LIGAN
PEMBANDING DAN SENYAWA UJI**

Keterangan Tabel:



<i>% Human Intestinal Absorption (HIA)</i>	= (a) 70-100% <i>well absorbed</i> (b) 20-70% <i>moderately absorbed</i> (c) 0-21% <i>poorly absorbed</i>
<i>In Vitro Caco-2 cell permeability (nm sec⁻¹)</i>	= (a) >70 <i>higher permeability</i> (b) 4-70 <i>medium permeability</i> (c) <4 <i>low permeability</i>
<i>Plasma protein binding</i>	= (a) >90% <i>strongly bound</i> (b) <90% <i>weakly bound</i>

LAMPIRAN 9

PREDIKSI SIFAT TOKSISITAS LIGAN PEMBANDING DAN SENYAWA UJI

Tabel V.6

Hasil Prediksi Sifat Toksisitas Ligan Pembanding dan Senyawa Uji Pada Reseptor InhA (*enoylacyl-acyl carrier protein (ACP) reductase*)

No.	Senyawa	Karsinogenik	Mutagenik
1.	Isoniazida (Ligan Pembanding)	Positif	Mutagen
2.	Carpaine	Negatif	Non-mutagen
3.	Choline	Negatif	Mutagen
4.	Cyclocarposide	Positif	Non-mutagen
5.	Dehydrocarpaine I	Negatif	Non-mutagen
6.	Dehydrocarpaine II	Negatif	Mutagen
7.	Gymnocarposide	Negatif	Mutagen
8.	Leiocarposide	Negatif	Non-mutagen
9.	Macrocarposide	Negatif	Mutagen
10.	Pseudocarpaine	Negatif	Non-mutagen
11.	Vit. C (Asam Askorbat)	Negatif	Mutagen
12.	Vit. E (Tokoferol)	Negatif	Non-mutagen



Yulia Amanda



Data Pribadi

Tempat Tanggal Lahir:
Garut, 03 Juli 1997
Jenis kelamin:
Perempuan

Alamat:

Kp Kubang RT 01 RW 02
Ds. Sanding Kec.
Malangbong Kab. Garut

Telepon:

082217535504

Agama:

Islam

Pekerjaan:

Mahasiswa

Email:

yulia.amanda93@gmail.com

Kemampuan

- Ms. Word, Ms. Excel, Ms. Power Point
- Menjalankan Komputer, Spektrofotometri UV-Vis
- Bahasa Indonesia (aktif), Bahasa Inggris (asif)

Penghargaan

Juara III Karete kejuaraan SMKN 4 Garut cup "kumite -55 kg U21 Putri" SMKN 4 Garut 2018

Pendidikan

No.	Pendidikan	Institusi	Tahun
1	SD	SD Negeri Sanding 1	2004 - 2010
2	SMP	SMP Negeri 2 Malangbong	2010 - 2013
3	SMK	SMK Kesehatan Bhakti Kencana Ciawi	2013 - 2016
4	Sarjana	Universitas Garut	2016 - 2020

Pengalaman Organisasi

No.	Jabatan	Organisasi	Periode
1	Bendahara	UKM Karate	2017 - 2018
2	Anggota Magang Organisasi	BEM	2018
3	Anggota	LDK Asy-Syifa FMIPA UNIGA	2016 - 2017
4	Anggota	Al Quds Volunteer (AVI) Garut	2016 - 2017
5	Anggota Osis	Osis	2011 - 2012
6	Anggota - Pengurus	Pramuka	2007 - 2013

Riwayat Pekerjaan

Magang :

1. Puskesmas Pembantu selama 3 bulan (Agustus – Oktober 2019) di Kp. Kubang Ds. Sanding Kec. Malangbong Kab. Garut
2. PT. Bio Farma (Persero) selama 6 bulan (07 Februari – 31 Juli 2020) di Jl. Pasteur, Kec. Sukajadi, Kota Bandung, Jawa Barat 40161

Pelatihan

1. Pelatihan Instrumen Kimia Atomic Absorption Spectrophotometer (AAS) & Fourier Transform Infra Red (FTIR), FMIPA UNIGA, 2018
2. Latihan Kepemimpinan dan Manajemen Mahasiswa Farmasi "Dare To Lead It's Time To Show Up" FMIPA UNIGA, 2016
3. PEAK PERFORMANCE TRAINING "Tampil Percaya Diri, Berani Tampil, Mudah di Mengerti dan Berpengaruh" Indonesia Enterprener Club 2016
4. Pelatihan Dasar Kepemimpinan dan Kader Belanegara Mahasiswa UNIGA, 2016

Seminar

1. Seminar Online (Webinar) Unpad x Bio Farma "Produksi Farmasi Bio Farma", 2020
2. Seminar Online (Webinar) bersama Ismafarsi dan Badan POM "Lawan Hoax Obat dan Makanan" UNIGA 2019
3. Seminar Kementrian Keuangan Republik Indonesia " Mengenali dan Mengawasi APBN #UangKita" UNIGA 2019
4. Seminar PHBI FMIPA UNIGA "Perfect Journey From a Short Time Al Isra' Walmi'raj Nabi Muhammad SAW", 2018
5. Seminar Al-Quran API UMMAT "Dimana Ada Al-Quran, Disitu ada Gue", Mesjid Islamic Center, 2017
6. Seminar Kewirausahaan Dan Pemuda Mandiri "Bagaimana Mendapatkan Nilai A di Kelas dan di Kehidupan , Indonesia Entrepreneur Club, 2016