

DAFTAR PUSTAKA

1. Sayuti M, Nouva N. KANKER KOLOREKTAL. *AVERROUS*. 2019;5(2):76. doi:10.29103/averrous.v5i2.2082
2. Bouk LAE, Sasputra IN, Wungouw HPL, Rante SDT. FAKTOR RISIKO YANG BERHUBUNGAN DENGAN KEJADIAN KANKER KOLOREKTAL DI RSUD PROF.DR.W.Z. JOHANNES KUPANG. *CMJ*. 2021;9(1):135-140. doi:10.35508/cmj.v9i1.4947
3. Komite Penanggulangan Kanker Nasional. PANDUAN PENATALAKSANAAN KANKER KOLOREKTAL. Published online March 22, 2017. <https://spesialis2.bd.fk.unair.ac.id/wp-content/uploads/2017/03/PPKKolorektal.pdf>
4. American Cancer Society. Treating Colorectal Cancer. Published June 29, 2020. <https://www.cancer.org/cancer/colon-rectal-cancer/treating.html>
5. American Cancer Society. Chemotherapy for Colorectal Cancer. Published June 29, 2020. <https://www.cancer.org/cancer/colon-rectal-cancer/treating/chemotherapy.html>
6. Benarba B, Pandiella A. Colorectal cancer and medicinal plants: Principle findings from recent studies. *Biomedicine & Pharmacotherapy*. 2018;107:408-423. doi:10.1016/j.biopha.2018.08.006
7. Malek SNA, Lee GS, Hong SL, et al. Phytochemical and Cytotoxic Investigations of Curcuma mangga Rhizomes. *Molecules*. 2011;16(6):4539-4548. doi:10.3390/molecules16064539
8. Andriana D. PENGARUH FRAKSI AIR EKSTRAK RIMPANG TEMU MANGGA TERHADAP EKSPRESI Ki67 PADA GALUR SEL KARSINOMA KOLON HT-29. *JIKMH*. 2015;4(1):39-48. doi:10.33475/jikmh.v4i1.166
9. Prasetiawati R, Meilanda S, Permana B. Studi In Silico Senyawa Yang Terkandung Di Dalam Rimpang Temulawak (*Curcuma xanthorrhiza* Roxb.) Sebagai Antihepatitis B. *JIFI*. 2021;4(2). doi:10.36387/jifi.v4i2.788
10. Rompis AY, Dewi NNA. Aspek Genetik Kanker Kolorektal. . Vol. 2(3).
11. AntiCancer Fund. Apa itu Kanker Kolorektal? <https://www.esmo.org/content/download/499359/9551394/1/ID-Kanker-Kolorektal-Panduan-untuk-Pasien.pdf>

12. GLOBOCAN. Cancer incidence and mortality statistics worldwide and by region. Global Cancer Observatory. Published 2020.
<https://gco.iarc.fr/today/data/factsheets/cancers/39-All-cancers-fact-sheet.pdf>
13. GLOBOCAN. Cancer incidence and mortality statistics Indonesia. Global Cancer Observatory. Published 2020.
<https://gco.iarc.fr/today/data/factsheets/populations/360-indonesia-factsheets.pdf>
14. Vacante M, Ciuni R, Basile F, Biondi A. Gut Microbiota and Colorectal Cancer Development: A Closer Look to the Adenoma-Carcinoma Sequence. *Journal Biomedicines*. 2020;8(489):5.
doi:doi:10.3390/biomedicines8110489
15. Kunyit Mangga. PLANTAMOR.
<http://plantamor.com/species/info/curcuma/mangga#gsc.tab=0>
16. Muchtaromah B. *SKRINING FITOKIMIA, ANTIOKSIDAN DAN ANTIMIKROBA Curcuma mangga rhizome UNTUK KESUBURAN WANITA*. Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim; 2014.
<https://core.ac.uk/download/pdf/185520973.pdf>
17. Evizal R. *Tanaman Rempah dan Fitofarmaka*. Lembaga Penelitian Universitas Lampung; 2013.
<http://repository.lppm.unila.ac.id/11102/1/Rempah%20%26%20Fitofarmaka-Rusdi%20Evizal.pdf>
18. Mutmainah F. *PENGARUH VARIASI PELARUT PADA EKSTRAKSI RIMOANG TEMU MANGGA (Curcuma mangga Val.) TERHADAP POTENSI AKTIVITAS ANTIOKSIDAN DAN ANTIFUNGI SECARA IN VITRO*. Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim; 2015.
<http://etheses.uin-malang.ac.id/3134/1/11620015.pdf#page22>
19. Hartono YI, Widyastuti I, Luthfah HZ, Islamadina R, Can AT, Rohman A. Total Flavonoid Content and Antioxidant Activity of Temu Mangga (*Curcuma mangga* Val. & Zijp) and its Classification with Chemometrics. *J Food Pharm Sci*. Published online September 1, 2020:4.
doi:10.22146/jfps.650
20. Rofiah AL. *Studi Aspek Etnobotani, Fitokimia, Farmakologi, dan Toksikologi Rimpang Temu Mangga (Curcuma mangga Val. & Zijp)*. Universitas Gadjah Mada; 2022.
<http://etd.repository.ugm.ac.id/penelitian/detail/217463>

21. Suhud F. Uji Aktivitas In-silico Senyawa Baru 1-Benzil-3-benzoilurea Induk dan Tersubstitusi sebagai Agen Antiproliferatif. *Jurnal Farmasi Indonesia*. 2015;7(4).
22. Purwanto ambang T. KIMIA MEDISINAL DAN PERANANNYA DALAM PENGEMBANGAN OBAT BARU. Fakultas Farmasi. Published April 8, 2021. <https://ff.unair.ac.id/wrt/800/kimia-medisinal-dan-peranannya-dalam-pengembangan-obat-baru.html>
23. Puspita D. *STUDI IN SILICO SENYAWA DALAM EKSTRAK ETANOL 96% DAUN KRISAN (Chrysanthemum cinerariifolium (Trev.)) TERHADAP RESEPTOR ESTROGEN ALFA (5W9C).pdf*. Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim; 2020. <http://etheses.uin-malang.ac.id/19684/1/16670008.pdf#page22>
24. Yu W, MacKerell AD. Computer-Aided Drug Design Methods. In: Sass P, ed. *Antibiotics*. Vol 1520. Methods in Molecular Biology. Springer New York; 2017:85-106. doi:10.1007/978-1-4939-6634-9_5
25. Chang Y, Hawkins BA, Du JJ, Groundwater PW, Hibbs DE, Lai F. A Guide to In Silico Drug Design. *Pharmaceutics*. 2022;15(1):49. doi:10.3390/pharmaceutics15010049
26. Kawade D, Kinkar MG, Gore N, Gadodiya M, Sahastrabuddhe M, Dubey M. COMPUTER-AIDED DRUG DESIGN (CADD) & MOLECULAR MODELLING IMPORTANCE IN PHARMACEUTICAL SCIENCES. *Journal of Emerging Technologies and Innovative Research (JETIR)*. 2021;8(6). <https://www.jetir.org/papers/JETIR2106076.pdf#page22>
27. Elfita L, Apriadi A, Supandi S, Dianmurdedi S. Studi Penambatan Molekuler dan Simulasi Dinamika Molekuler Senyawa Turunan Furanokumarin terhadap Reseptor Estrogen Alfa (ER- α) Sebagai Anti Kanker Payudara. *J Sains Farm Klin*. 2023;9(3):255. doi:10.25077/jsfk.9.3.255-264.2022
28. Rachmania RA, Hariyanti. *STUDI DINAMIKA MOLEKULAR SAPPAN KALKON DARI KAYU SECANG (Caesalpinia sappan L.) SEBAGAI PENGHAMBAT XANTIN OKSIDASE PADA HIPERURISEMIA*. Universitas Muhammadiyah Prof. Dr. Hamka; 2020. <http://repository.uhamka.ac.id/id/eprint/2457/1/Laporan%20Penelitian%20Mandiri%20Rizky%20Arcintha%20R%20dan%20Bu%20Hariyanti.pdf#page22>
29. Farinde A. Drug-Receptor Interactions. MSD Manual Professional version. Published 2022. <https://www.msdmanuals.com/professional/clinical-pharmacology/pharmacodynamics/drug%E2%80%93receptor-interactions>

30. Govindarasu M, Ganeshan S, Ansari MA, et al. In silico modeling and molecular docking insights of kaempferitrin for colon cancer-related molecular targets. *Journal of Saudi Chemical Society*. 2021;25(9):101319. doi:10.1016/j.jscs.2021.101319
31. Ramesh P, Medema JP. BCL-2 family deregulation in colorectal cancer: potential for BH3 mimetics in therapy. *Apoptosis*. 2020;25(5-6):305-320. doi:10.1007/s10495-020-01601-9
32. Rose PW, Prlić A, Bi C, et al. The RCSB Protein Data Bank: views of structural biology for basic and applied research and education. *Nucleic Acids Research*. 2015;43(D1):D345-D356. doi:10.1093/nar/gku1214
33. Morris GM, Huey R, Lindstrom W, et al. AutoDock4 and AutoDockTools4: Automated docking with selective receptor flexibility. *J Comput Chem*. 2009;30(16):2785-2791. doi:10.1002/jcc.21256
34. Sandeep G, Nagasree KP, Hanisha M, Kumar MMK. AUDocker LE: A GUI for virtual screening with AUTODOCK Vina. *BMC Res Notes*. 2011;4(1):445. doi:10.1186/1756-0500-4-445
35. Dassault Systemes. BIOVIA DISCOVERY STUDIO® 2021 COMPREHENSIVE MODELING AND SIMULATIONS FOR LIFE SCIENCES. Published online 2021. <https://www.3ds.com/fileadmin/PRODUCTS-SERVICES/BIOVIA/PDF/whats-new-in-discovery-studio-2021.pdf>
36. Afendi FM, Okada T, Yamazaki M, et al. KNApSAcK Family Databases: Integrated Metabolite–Plant Species Databases for Multifaceted Plant Research. *Plant and Cell Physiology*. 2012;53(2):e1-e1. doi:10.1093/pcp/pcr165
37. Kim S, Chen J, Cheng T, et al. PubChem in 2021: new data content and improved web interfaces. *Nucleic Acids Research*. 2021;49(D1):D1388-D1395. doi:10.1093/nar/gkaa971
38. PASS Online. way2drug. Published 2023. <http://way2drug.com/PassOnline/definition.php>
39. Widiastuti A, Susanti E, Yunita N, Yamtinah S. *Chem Office*. Program Studi Pendidikan Kimia Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan (FKIP) Universitas Sebelas Maret Surakarta; 2018. <https://nurma.staff.uns.ac.id/files/2018/10/ModulChemOffice-BW.pdf>
40. Padre, the Perl IDE. Published February 26, 2016. <https://padre.perlide.org>

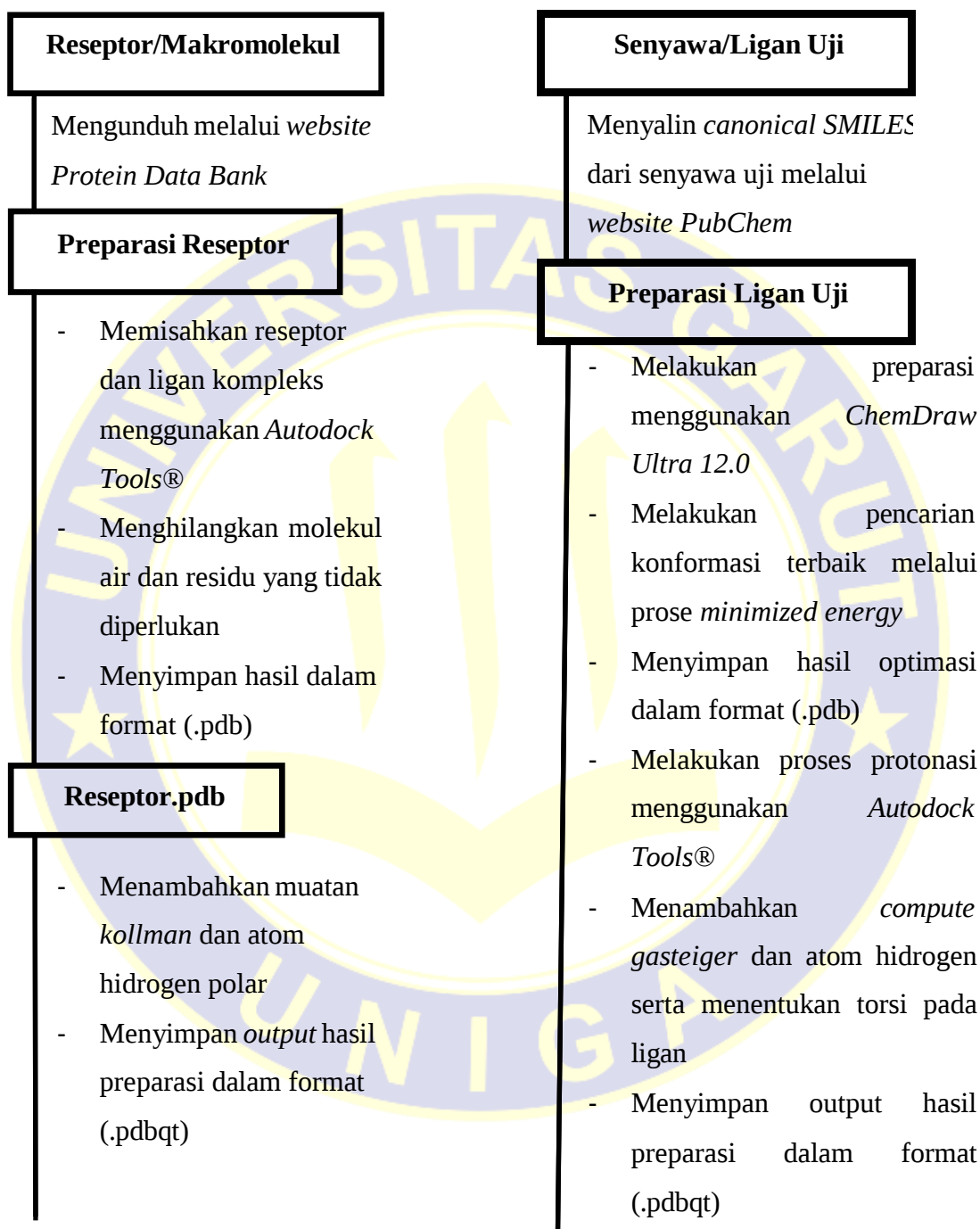
41. Lipinski CA. Lead- and drug-like compounds: the rule-of-five revolution. *Drug Discovery Today: Technologies*. 2004;1(4):337-341. doi:10.1016/j.ddtec.2004.11.007
42. Lipinski CA, Lombardo F, Dominy BW, Feeney PJ. Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings 1PII of original article: S0169-409X(96)00423-1. The article was originally published in *Advanced Drug Delivery Reviews* 23 (1997) 3–25. 1. *Advanced Drug Delivery Reviews*. 2001;46(1-3):3-26. doi:10.1016/S0169-409X(00)00129-0
43. Kartasasmita RE, Anugrah R, Tjahjono DH. KAJIAN DOCKING DAN PREDIKSI BEBERAPA ASPEK FARMAKOKINETIKA DESAIN MOLEKUL TURUNAN KUININ SEBAGAI UPAYA MENEMUKAN KANDIDAT SENYAWA ANTIMALARIA YANG BARU. *kjif*. 2015;3(1):13. doi:10.26874/kjif.v3i1.13
44. Susanti, Warditiani, Juwianti, Wisesa. Potensi Toksisitas Andrografolid dari Sambiloto (*Andrographis paniculata* (Burm.f.) Nees) pada kulit dan mata secara In Silico. *Jurnal Farmasi Udayana*. 2017;6(1):47-49.
45. Yuliana A, Saputri OA, Adlina S. MOLECULAR DOCKING DAN UJI TOKSISITAS REMDESIVIR, LOPINAVIR, RITONAVIR DAN FAVIPIRAVIR TERHADAP M-PROTEASE SARS-CoV-2. *Pharmacoscript*. 2022;5(1):38-55.
46. Google Colaboratory. <https://colab.research.google.com/notebooks/intro>
47. OpenMM. <https://openmm.org/>
48. Eastman P, Swails J, Chodera JD, et al. OpenMM 7: Rapid development of high performance algorithms for molecular dynamics. Gentleman R, ed. *PLoS Comput Biol*. 2017;13(7):e1005659. doi:10.1371/journal.pcbi.1005659
49. Filimonov DA, Lagunin AA, Glorizova TA, et al. Prediction of the Biological Activity Spectra of Organic Compounds Using the Pass Online Web Resource. *Chem Heterocycl Comp*. 2014;50(3):444-457. doi:10.1007/s10593-014-1496-1
50. Malikhana A, Yuniastuti A, Susanti R, Nugrahaningsih WH. STUDI IN SILICO POTENSI SENYAWA BIOAKTIF GEMBILI (*Dioscorea esculenta*) SEBAGAI LIGAN PADA RESEPTOR G6PD DAN PTPN1. *Prosiding Semnas Biologi ke-9*. Published online 2021. <https://proceeding.unnes.ac.id/index.php/semnasbiologi/article/view/790/6>

51. Kusumawati RD, Yuniastuti A, Susanti R, Nugrahaningsih WH. STUDI IN SILICO POTENSI SENYAWA BIOAKTIF PADA KAPULAGA JAWA (*Amomum compactum*) SEBAGAI ANTIINFLAMASI. *Prosiding Semnas Biologi ke-9*. 2021;9:304-309.
52. Fatimah DS, Oktaviani DJ, Widiyastuti S, et al. PEMODELAN FARMAKOFOR, SKRINING VIRTUAL, DAN PENAMBATAN MOLEKUL SENYAWA METABOLIT DALAM EKSTRAK DAUN SALAM (*Syzygium polyanthum* (Wight) Walp.) SEBAGAI SENYAWA ANTIHIPERTENS. *Jurnal Farmasi Galenika*. 2020;7(2):91-107.
53. Sari IW, Junaidin J, Pratiwi D. STUDI MOLECULAR DOCKING SENYAWA FLAVONOID HERBA KUMIS KUCING (*Orthosiphon stamineus* B.) PADA RESEPTOR α -GLUKOSIDASE SEBAGAI ANTIDIABETES TIPE 2. *FARM.* 2020;7(2):54. doi:10.47653/farm.v7i2.194
54. Muchtaridi, Yanuar A, Megantara S, Purnomo H. *Kimia Medisinal: Dasar-Dasar Dalam Perancangan Obat*. I. Prenamedia Group; 2018.
55. Dewi PPP. Molecular Docking Terpinen-4-ol pada Protein IKK sebagai Antiinflamasi pada Aterosklerosis secara In Silico. *jfu*. Published online July 27, 2019;44. doi:10.24843/JFU.2019.v08.i01.p07
56. Fakih TM, Arumsari A, Dewi ML, Hazar N, Syarza TM. Simulasi Penambatan Molekuler Senyawa Kompleks Besi Terhadap Protein Hemofor sebagai Kandidat Fotosensitizer pada Terapi Fotodinamika. *AK*. 2021;8(1):1-8. doi:10.15575/ak.v8i1.8502
57. Umar MA. *KAJIAN IN VITRO DAN IN SILICO DAUN SIRIH MERAH SEBAGAI ANTIKANKER KOLON PADA SEL WIDR SERTA PROLIFERATOR SEL LIMFOSIT*. Institut Pertanian Bogor; 2022.
58. Hazar N, Arumsari A, Faqih TM. Analisis Mekanisme Interaksi Senyawa Turunan Ftalosianin terhadap Reseptor HasAp pada *Pseudomonas aeruginosa* dengan Metode in Silico. 2020;6(2).
59. Putri RG, Safithri M, Husnawati H, Kurniasih R. Penambatan Molekuler Senyawa Aktif Sirih Merah (*Piper crocatum*) pada Butirilkolinesterase sebagai Kandidat Antialzheimer. *ALCHEMY JPenKim*. 2023;19(1):68. doi:10.20961/alchemy.19.1.59676.68-85
60. Nursamsiar, Toding AT, Awaluddin A. STUDI IN SILICO SENYAWA TURUNAN ANALOG KALKON DAN PIRIMIDIN SEBAGAI ANTIINFLAMASI: PREDIKSI ABSORPSI, DISTRIBUSI, DAN TOKSISITAS. *PHARMACY*. 2016;13(01):92-100.

61. Muttaqin FZ, Ismail H, Muhammad HN. STUDI MOLECULAR DOCKING, MOLECULAR DYNAMIC, DAN PREDIKSI TOKSISITAS SENYAWA TURUNAN ALKALOID NAFTIRIDIN SEBAGAI INHIBITOR PROTEIN KASEIN KINASE 2- α PADA KANKER LEUKEMIA. *Pharmacoscript*. 2019;2(1):49-64.
62. Dermawan D, Sumirtanurdin R, Dewantisari D. Molecular Dynamics Simulation of Estrogen Receptor Alpha Against Andrografolid as Anti Breast Cancer.
63. Liu K, Kokubo H. Exploring the Stability of Ligand Binding Modes to Proteins by Molecular Dynamics Simulations: A Cross-docking Study. *J Chem Inf Model*. 2017;57(10):2514-2522. doi:10.1021/acs.jcim.7b00412
64. Biswas S, Mahmud S, Mita MA, et al. Molecular Docking and Dynamics Studies to Explore Effective Inhibitory Peptides Against the Spike Receptor Binding Domain of SARS-CoV-2. *Front Mol Biosci*. 2022;8:791642. doi:10.3389/fmolb.2021.791642
65. Khatiwada P. Determination of Center of Mass and Radius of Gyration of Irregular Buildings and its Application in Torsional Analysis. 2020;07(10).

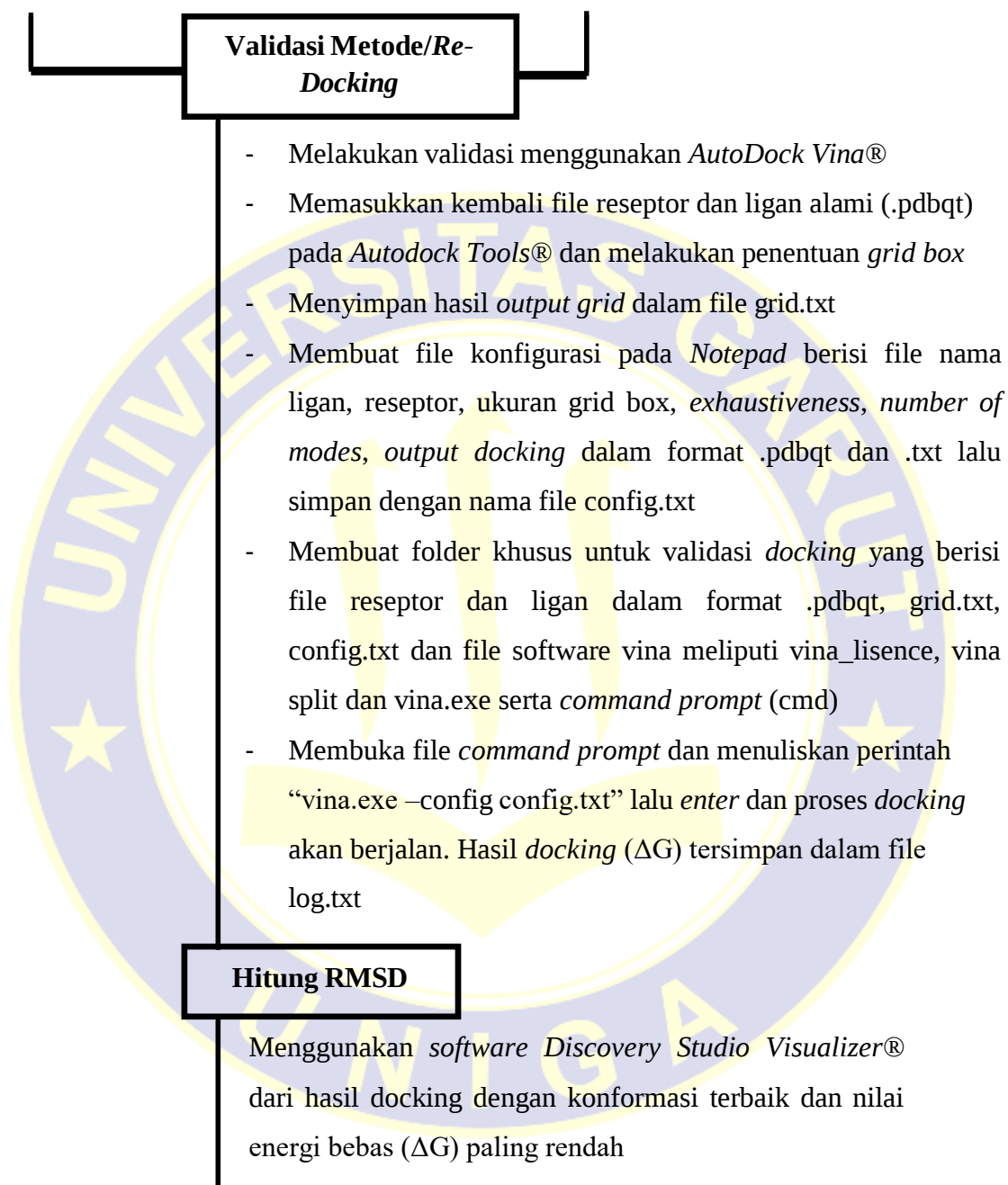
LAMPIRAN 1

ALUR PENELITIAN SIMULASI *MOLECULAR DOCKING* SENYAWA AKTIF TEMU MANGGA (*Curcuma amada*)



Gambar VII. 1 Alur penelitian *molecular docking* senyawa aktif temu mangga (*Curcuma amada*)

LAMPIRAN 1 (LANJUTAN)



Gambar VII. 1 Alur penelitian *molecular docking* senyawa aktif temu mangga (*Curcuma amada*)

LAMPIRAN 1 (LANJUTAN)

Simulasi *Docking*

- Menggunakan *Auto Dock Vina*®
- Membuat folder khusus untuk *docking* senyawa uji yang berisi reseptor.pdbqt, ligand.txt (nama senyawa uji hasil preparasi), grid.txt, config.txt, vina_windows.pl dan file software vina meliputi vina_licence, vina_split dan vina.exe serta *command prompt* (cmd) dan *Perl IDE*
- Membuka file *command prompt* dan menuliskan perintah “perl -v” untuk menyambungkan aplikasi dan kode yang sudah ditulis dalam format (.pl)
- Menuliskan lagi perintah “perl vina_windows.pl” kemudian muncul *ligand_file* yang akan diisi dengan nama file ligand.txt lalu *enter* dan proses *docking* akan berjalan. Hasil *docking* (ΔG) tersimpan dalam file log.txt

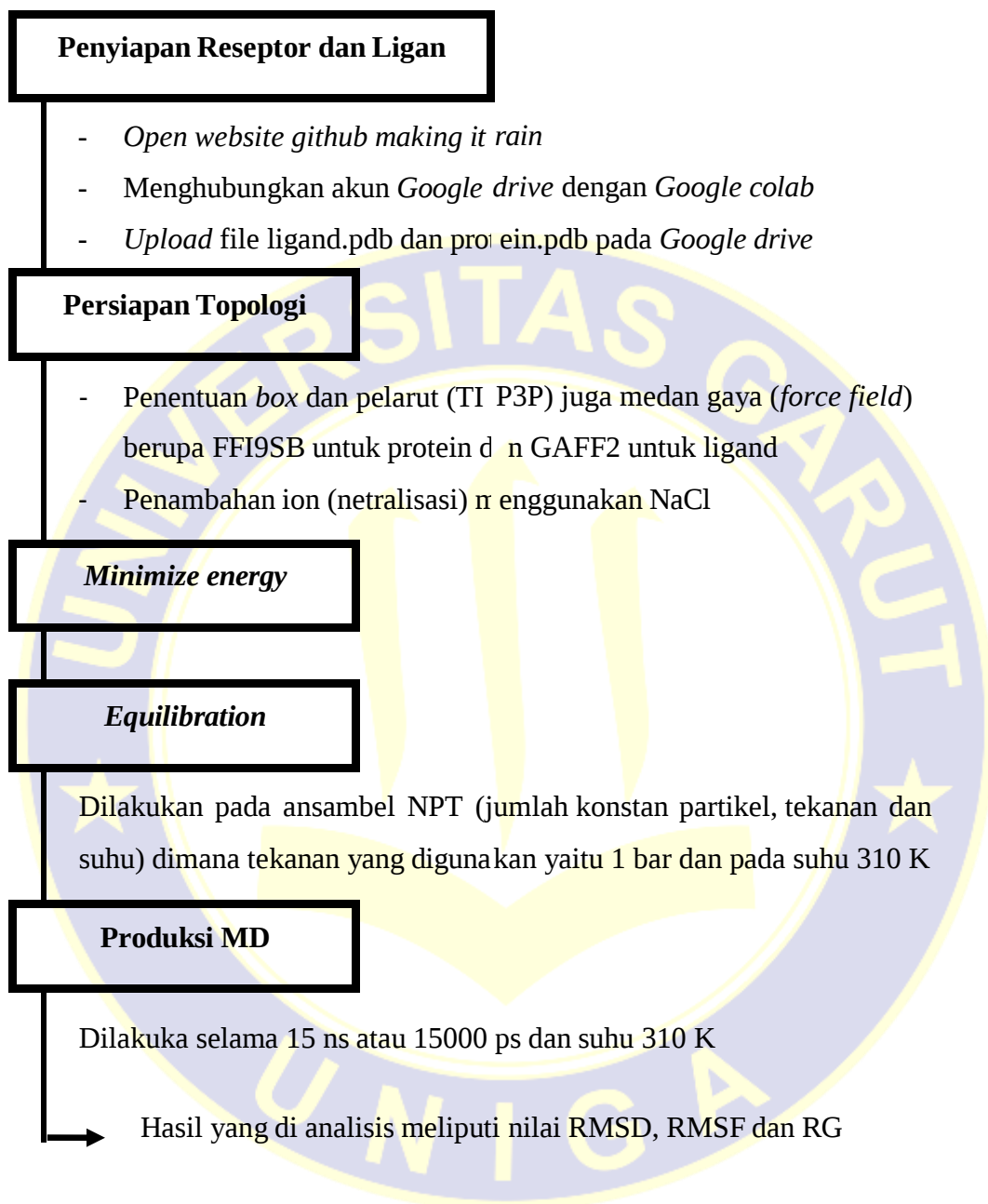
Analisis Hasil

- Hasil yang akan diperoleh dari *docking* adalah nilai energi bebas (ΔG) yang akan tersimpan secara otomatis pada folder *docking* senyawa uji
- Kemudian dilakukan visualisasi menggunakan *software Discovery Studio Visualizer*® untuk melihat residu asam amino yang berinteraksi pada saat proses *docking* serta jenis interaksi dengan reseptor.

Gambar VII. 1 Alur penelitian *molecular docking* senyawa aktif temu mangga (*Curcuma amada*)

LAMPIRAN 92

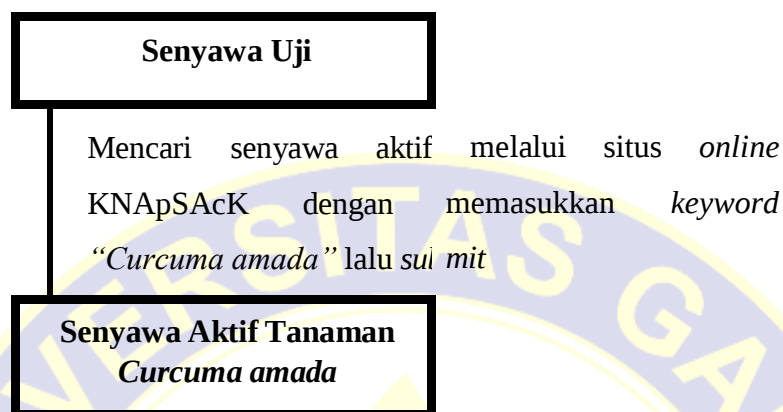
ALUR PENELITIAN SIMULASI *MOLECULAR DYNAMIC* (MD)



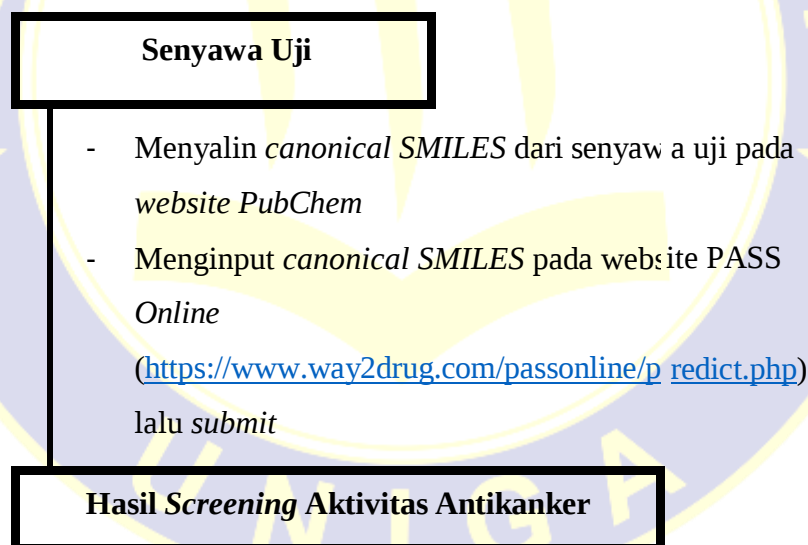
Gambar VII. 2 Alur penelitian *molecular dynamic* (MD) senyawa aktif temu mangga (*Curcuma amada*)

LAMPIRAN 3

ALUR PENCARIAN SENYAWA AKTIF, *SCREENING* AKTIVITAS ANTIKANKER, ANALISIS FISIKOKIMIA, ANALISIS FARMAKOKINETIKA DAN ANALISIS TOKSISITAS

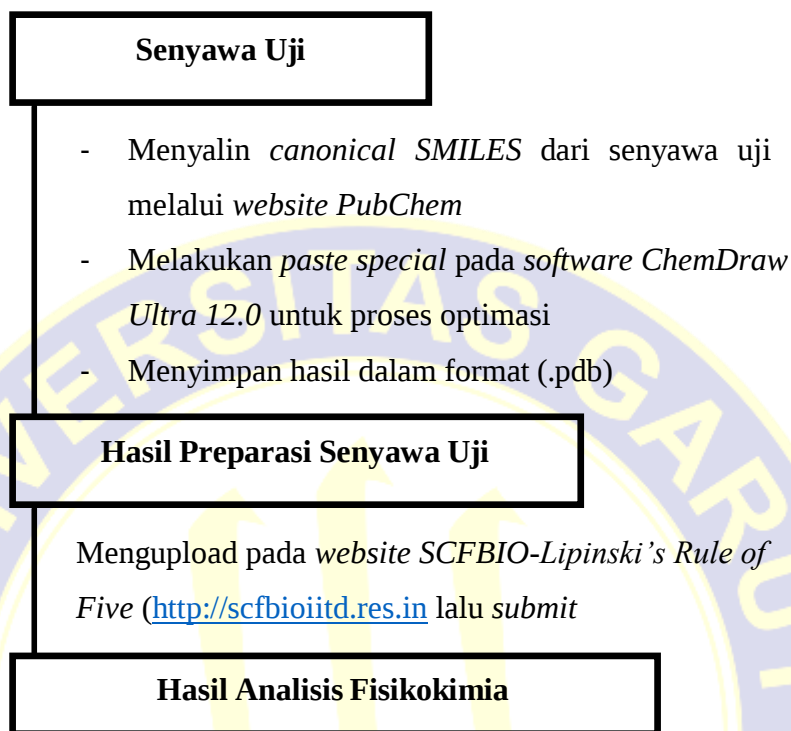


Gambar VII. 3 Alur penelitian pencarian senyawa aktif temu mangga (*Curcuma amada*)

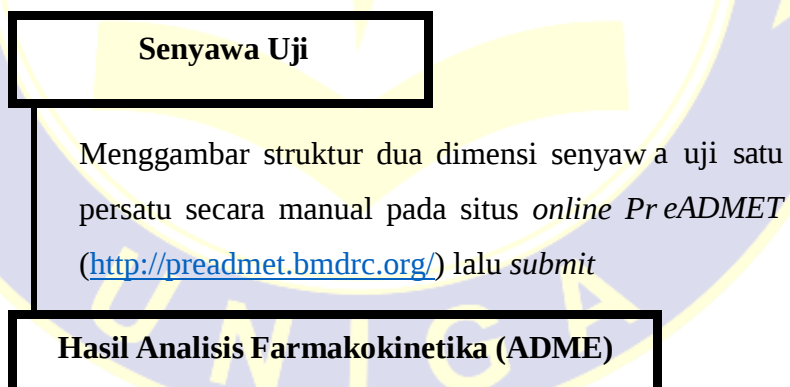


Gambar VII. 4 Alur penelitian skrining aktivitas antikanker

LAMPIRAN 3 (LANJUTAN)

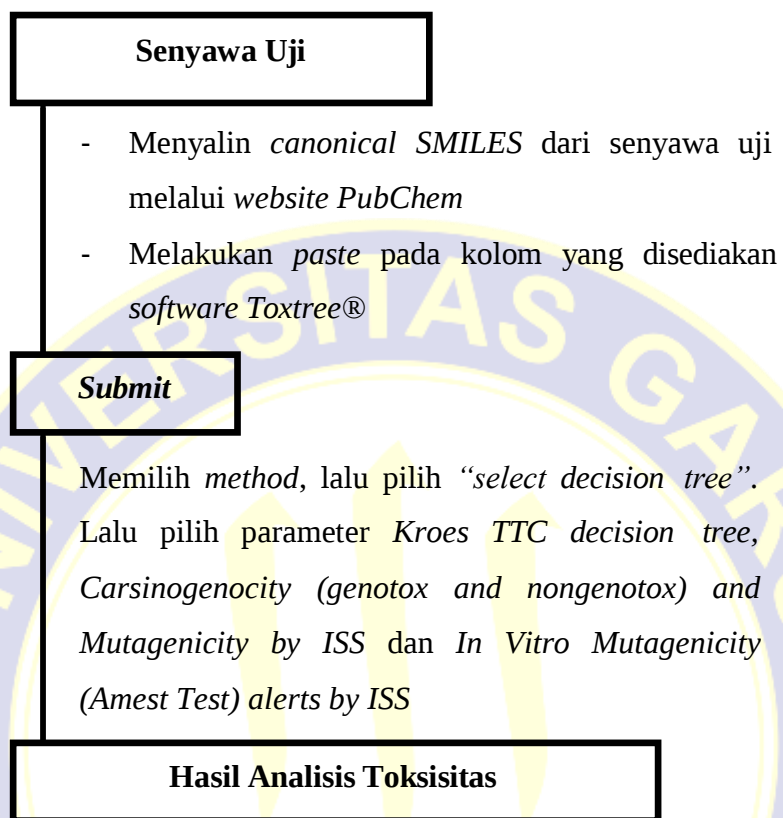


Gambar VII. 5 Alur penelitian analisis fisikokimia



Gambar VII. 6 Alur penelitian analisis farmakokinetika

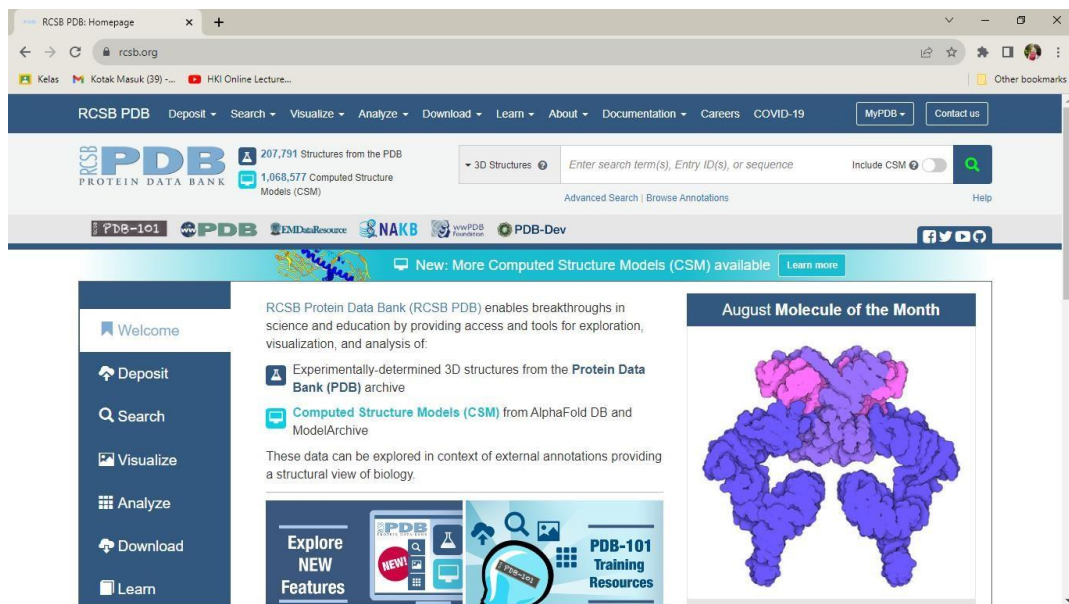
LAMPIRAN 3 (LANJUTAN)



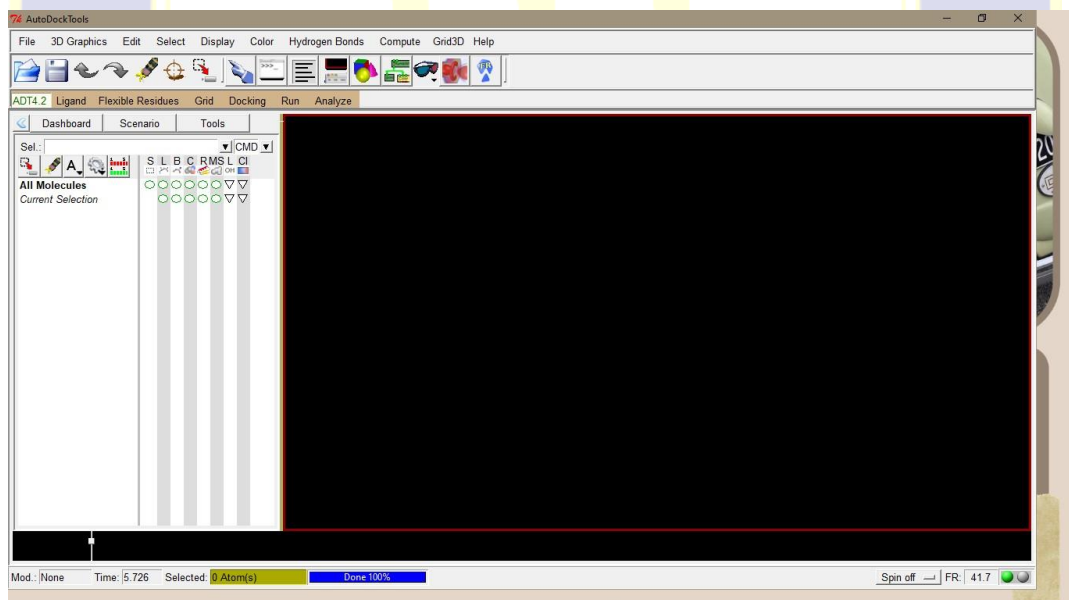
Gambar VII. 7 Alur penelitian analisis toksisitas

LAMPIRAN 4

SITUS DAN APLIKASI



Gambar VII. 8 Tampilan situs *Protein Data Bank*



Gambar VII. 9 Tampilan *Software Autodock Tools*

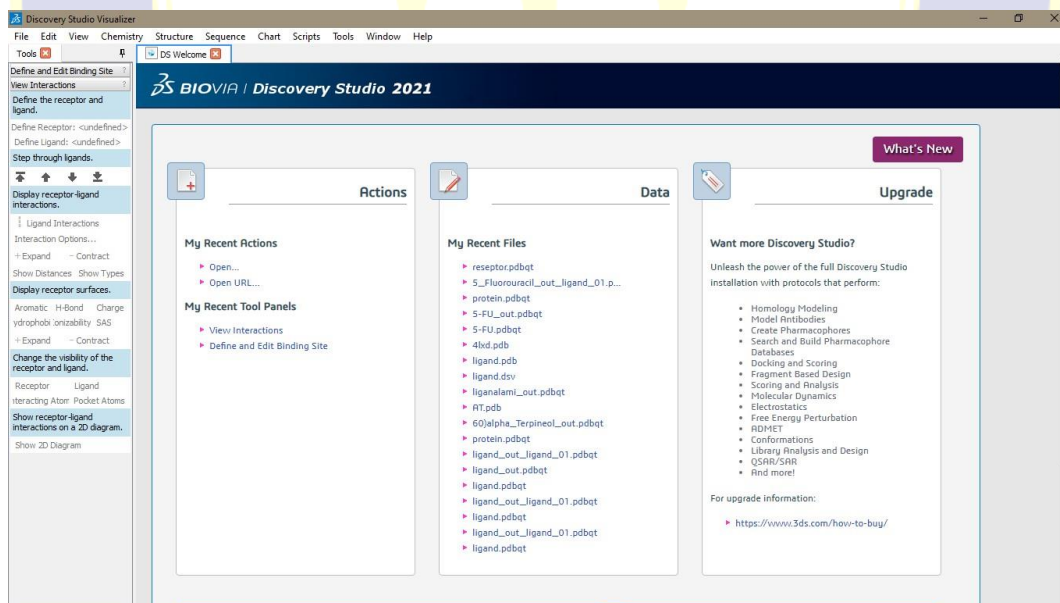
LAMPIRAN 4 (LANJUTAN)

```

C:\VASRI\Kuliah\Tugas Akhir\1\Molecular Docking\validasi hasil docking\vina>vina.exe --config config.txt
#####
# If you used AutoDock Vina in your work, please cite:
#
# O. Trott, A. J. Olson,
# AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking
# with a new scoring function, efficient optimization and
# multithreading, Journal of Computational Chemistry 31 (2010)
# 455-461
#
# DOI 10.1002/jcc.21334
#
# Please see http://vina.scripps.edu for more information.
#####
WARNING: The search space volume > 27000 Angstrom^3 (See FAQ)
Detected 2 CPUs
Reading input ... done.
Setting up the scoring function ... done.
Analyzing the binding site ... done.
Using random seed: 1782355776
Performing search ...
|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
0% 10 20 30 40 50 60 70 80 90 100%
|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
done.
Refining results ... done.
mode | affinity | dist from best mode
   | (kcal/mol) | rmsd l.b. | rmsd u.b.
-----|-----|-----|-----
1 | -10.4 | 0.000 | 0.000
2 | -10.3 | 1.133 | 1.356
3 | -10.0 | 2.014 | 2.650
4 | -9.6 | 4.198 | 6.522
5 | -9.3 | 4.427 | 7.583
6 | -9.1 | 3.819 | 12.386
7 | -9.0 | 2.627 | 3.417
8 | -8.9 | 4.097 | 12.744
9 | -8.9 | 4.008 | 13.675
10 | -8.9 | 3.983 | 12.764
Writing output ... done.
C:\VASRI\Kuliah\Tugas Akhir\1\Molecular Docking\validasi hasil docking\vina>vina_split.exe --input hasil.pdbqt
Prefix for ligands will be hasil_ligand
Prefix for flexible side chains will be hasil_flex_

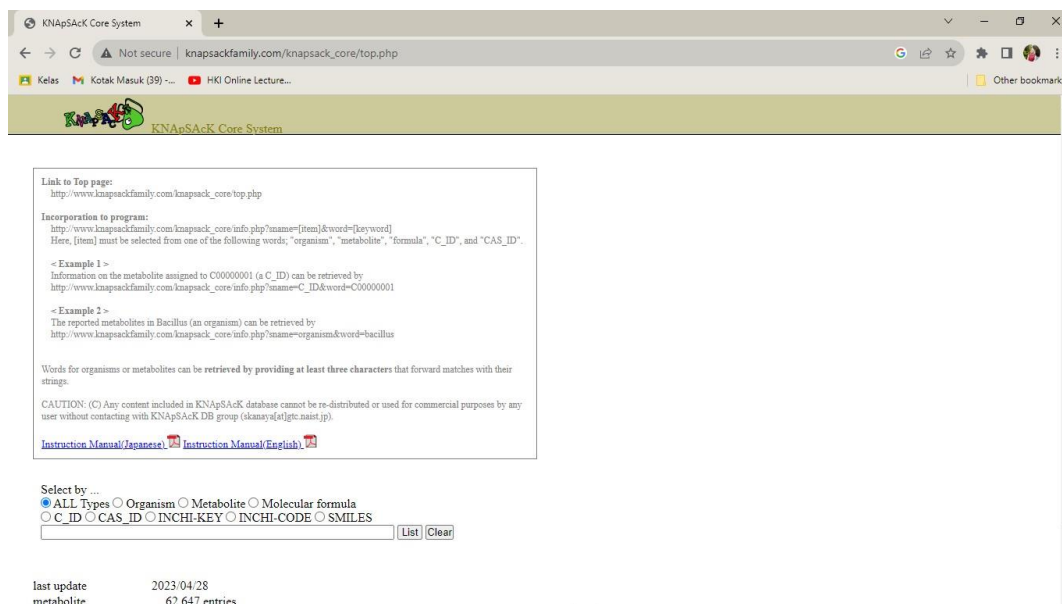
```

Gambar VII. 10 Tampilan Software Autodock Vina

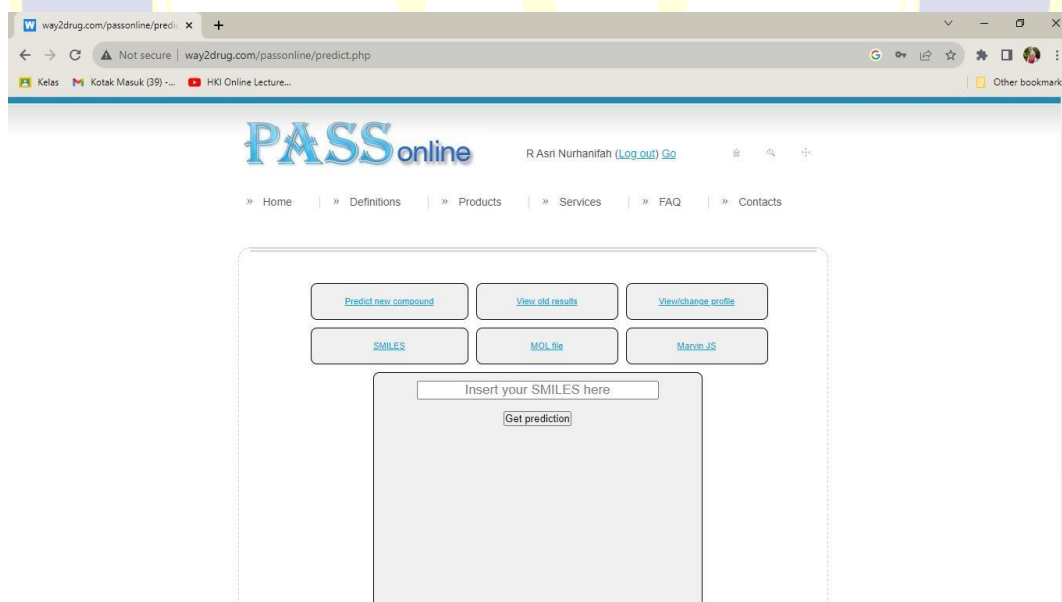


Gambar VII. 11 Tampilan Software Discovery Studio Visualizer

LAMPIRAN 4 (LANJUTAN)

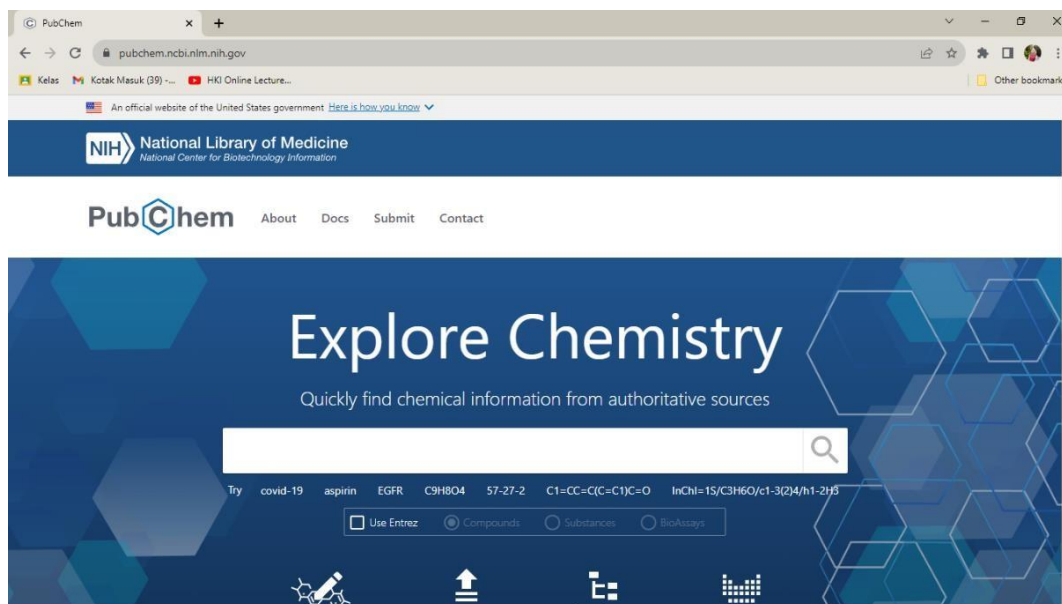


Gambar VII. 12 Tampilan situs KNApSACK

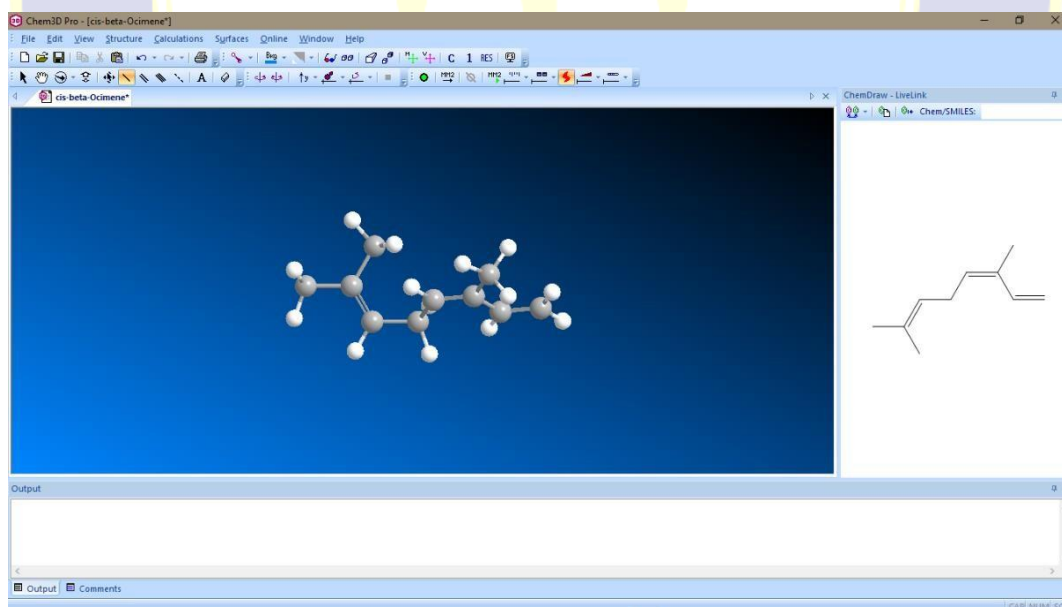


Gambar VII. 13 Tampilan situs PASS Online

LAMPIRAN 4 (LANJUTAN)



Gambar VII. 14 Tampilan situs *PubChem*



Gambar VII. 15 Tampilan *Software ChemDraw*

LAMPIRAN 4 (LANJUTAN)

The screenshot shows a web browser window with the URL `scfbio-itt.res.in/software/drugdesign/lipinski.jsp#anchortag`. The page is titled "Lipinski Rule of Five" and explains the rule's purpose: to predict the probability of success or failure of a molecule as a drug based on five criteria. The criteria listed are:

- Molecular mass less than 500 Dalton
- High lipophilicity (expressed as LogP less than 5)
- Less than 5 hydrogen bond donors
- Less than 10 hydrogen bond acceptors
- Molar refractivity should be between 40-130

Below the criteria, there is a section for "Step 1: Input Drug File." with a text input field containing "cis-beta-Ocimene.mol2" and a "Choose File" button. "Step 2: Input pH Value" has a text input field with "7" and a note "[Value ranges from 0.0 to 14.0]". "Step 3: Click on 'Submit' to submit your job" includes "Submit" and "Reset" buttons. A "Result" box displays the following data:

```

mass: 136.000000
hydrogen bond donor: 0
hydrogen bond acceptors: 0
LOGP: 3.474999
Molar Refractivity: 48.001987
  
```

At the bottom, there is a "How to Use the Tool" section.

Gambar VII. 16 Tampilan situs *Lipinski's Rule of Five*

The screenshot shows the homepage of the PreADMET web application. The header includes the site name "PreADMET" and contact information: Tel: +82-32-212-9550 / Fax: +82-32-212-9572, Email: webmaster@bmdrc.org, and address: 209, Veritas A Hall, Yonsei University 85 Songdogwahak-ro, Yeonsu-gu, Incheon 21983, Republic of Korea. The main navigation bar includes links for Home, About, Druglikeness, ADME, Toxicity, Community, and Commercial. The main content area features a "Welcome to the PreADMET" message and a list of services:

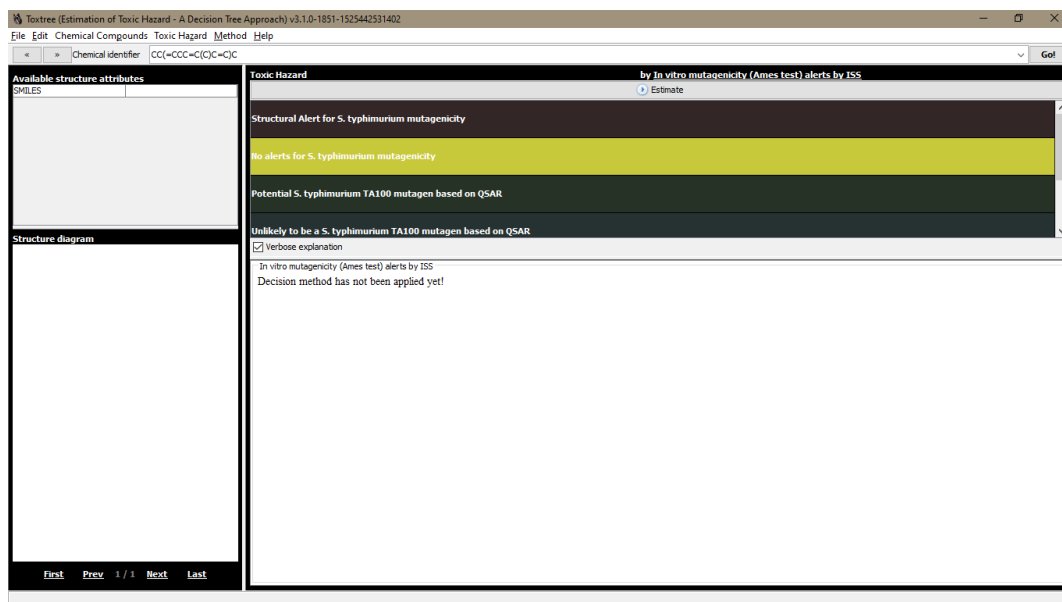
- Drug-Likeness Prediction**: Lipinski's rule, lead-like rule, Drug DB like rule
- ADME Prediction**: caco-2, MDCK, BBB, HIA, plasma protein binding and skin permeability data
- Toxicity Prediction**: Ames test and rodent carcinogenicity assay

On the right side, there is a "Lastest News" section with three articles:

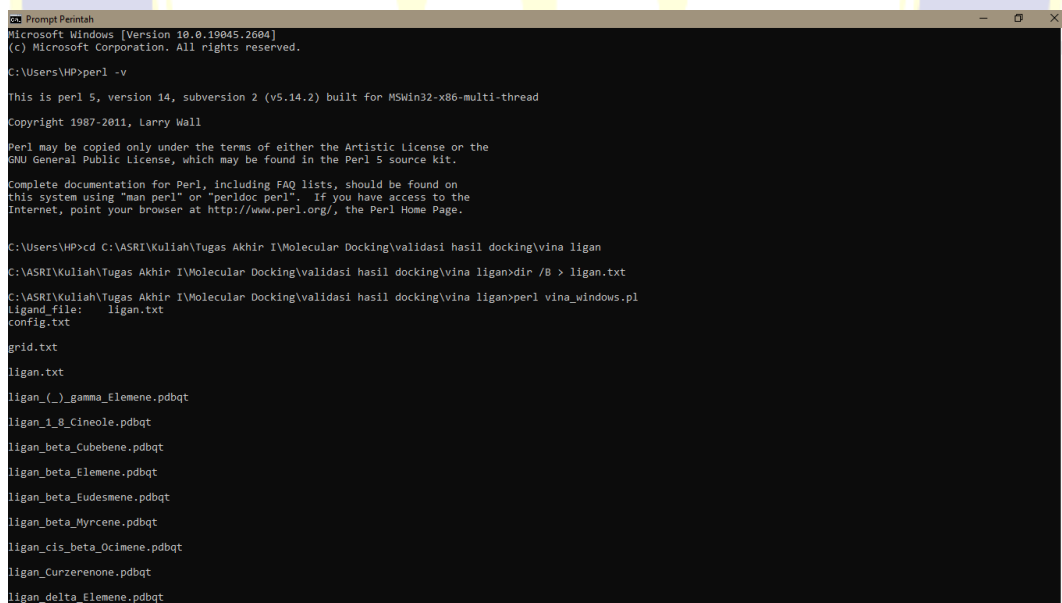
- G-SFED and Human Nephrotoxicity models will be added in Aug 2017 (January 24, 2017)
- PreADMET Ver 2.1 is coming soon in this month. (January 9, 2015)
- [2008/11] PreADMET is one of the most popular sites by Cheminformatics.org. (November 27, 2008)
- [2008/10] New release of PreADMET v2.0 windows version (November 27, 2008)

Gambar VII. 17 Tampilan situs *PreADMET*

LAMPIRAN 4 (LANJUTAN)

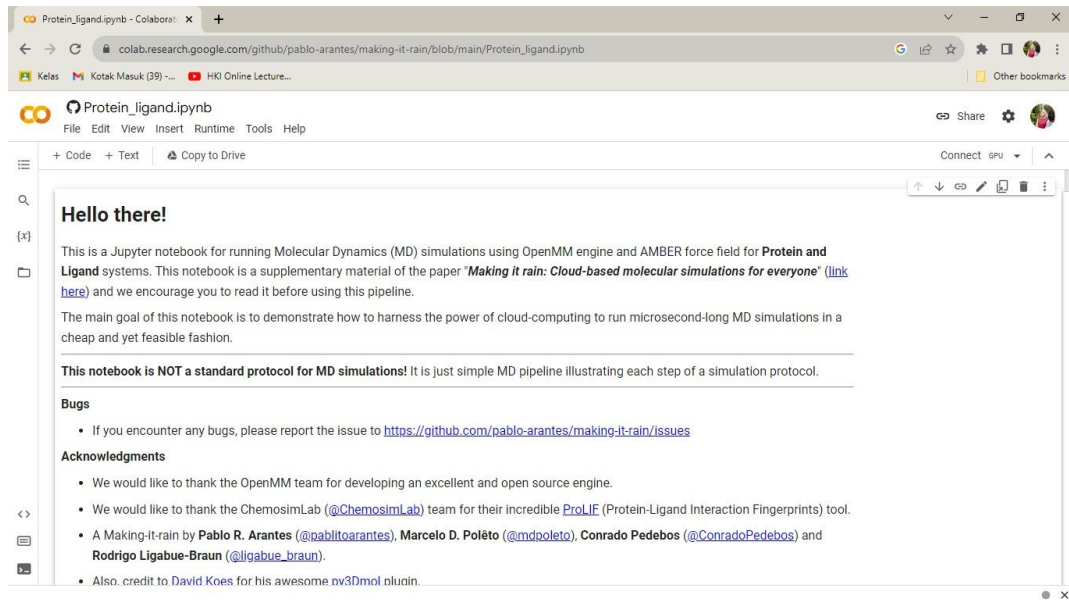


Gambar VII. 18 Tampilan *Software Toxtree*



Gambar VII. 19 Tampilan *Software Padre, the Perl IDE*

LAMPIRAN 4 (LANJUTAN)



Gambar VII. 20 Tampilan situs *Google Colab*

LAMPIRAN 5

HASIL PENAMBATAN SIMULASI MOLECULAR DOCKING

Tabel VII. 1

Hasil *Molecular Docking* dan Residu Asam Amino Senyawa Aktif Tanaman Temu Mangga (*Curcuma amada*) Terhadap Reseptor ID PDB 4LXD

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
	Ligan Alami	-10.5	GLY 142	ALA 97, PHE 101, PHE 109, MET 112, LEU 134, ALA 146, VAL 153	LEU 134 (Ikatan Hidrogen Karbon), TYR 199 (Ikatan Hidrogen Karbon, Pi-Pi Stacked)
	5-FU	-4.8	ALA 146	MET 112	PHE 109 (Ikatan Hidrogen Karbon), ASP 108 (Halogen), PHE 101 (Pi-Pi T-shaped)
1	alpha-Terpineol	-6.2	ALA 146	MET 112, VAL 130, LEU 134	-
2	4-Terpineol	-6.0	ALA 146	MET 112, VAL 130, LEU 134	-
3	beta-Terpineol	-5.8	ALA 146	MET 112	
4	1-Pentadecanol	-5.1	ALA 146	PHE 101, MET 112, VAL 130, LEU 134	-

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
5	Patchoulane	-8.1	-	PHE 109, MET 112, ALA 146, VAL 153	-
6	gamma-Eudesmol	-7.8	-	MET 112, LEU 134, ALA 146	-
7	beta-Caryophyllene	-7.6	-	LEU 134	-
8	Furanogermenone	-7.6	ARG 124	VAL 131, HIS 181	ALA 128 (Ikatan Hidrogen Karbon, Pi-Sigma)
9	Curcumenol	-7,6	-	PHE 101, PHE 109, LEU 134, ALA 146	-
10	gamma-Cadinene	-7.4	-	MET 112, ALA 146	-
11	beta-Copaene	-7.4	-	MET 112, LEU 134, ALA 146	-
12	Zerumbone	-7.3	-	ALA 97, VAL 145	TYR 199 (Pi-Sigma)
13	beta-Gurjunene	-7.3	-	ALA 97, VAL 145	TYR 199 (Pi-Sigma)

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
14	beta-Cubebene	-7.2	-	PHE 101, TYR 105, MET 112, LEU 134, ALA 146	-
15	beta-Eudesmene	-7.2	-	PHE 109, MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146, VAL 153	-
16	Furanodienon	-7.2	-	MET 112, LEU 134, ALA 146	-
17	epi-alpha-Cadinol	-7.2	-	PHE 101, VAL 130, LEU 134, ALA 146	-
18	tau-Muurolol	-7.2	-	PHE 101, VAL 130, LEU 134, ALA 146	-
19	allo-Aromadendrene	-7.2	-	ALA 97, PHE 101, VAL 145, TYR 199	-

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
20	(+)-ar-Turmerone	-7.1	-	PHE 109, ALA 146, VAL 153	PHE 101 (Pi-Pi T-shaped), TYR 105 (Pi-Pi T-shaped, Pi-Sigma)
21	(-)-beta-Caryophyllene epoxide	-7.1	-	MET 112, LEU 134, ALA 146	-
22	(-)-Curcuphenol	-7	-	PHE 109, ARG 143, ALA 146, VAL 153	PHE 101 (Pi-Pi T-shaped), TYR 105 (Pi-Sigma)
23	(-)-alpha-Selinene	-7	-	PHE 109, MET 112, VAL 130, LEU 134, VAL 153	-
24	Espatulenol	-6.9	-	LEU 134, ALA 146	-
25	alpha-Zingiberene	-6.9	-	PHE 101, PHE 109, MET 112, LEU 134, ALA 146, VAL 153	TYR 105 (Pi-Sigma)

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
26	beta-Bisabolol	-6.9	-	PHE 101, PHE 109, MET 112, LEU 134, ARG 143, ALA 146, VAL 153	TYR 105 (Pi-Sigma)
27	(-)-Germacrene D	-6.9	-	TYR 105, LEU 134, ALA 146	-
28	14-Hydroxy alpha-murolene	-6.9	ASP 108	PHE 101, PHE 109, MET 112, LEU 134, ALA 146	
29	Ledol	-6.8	-	PHE 101, TYR 105, MET 112, LEU 134, ALA 146, PHE 150	-
30	beta-Curcumene	-6.8	-	PHE 109, MET 112, LEU 134, ALA 146, VAL 153	PHE 101 (Pi-Pi T-shaped), TYR 105 (Pi-Pi T-shaped, Pi-Sigma)

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
31	Humulene 1,2-epoxide	-6.8	-	PHE 101, ALA 146	-
32	(+)-beta-Costol	-6.8	-	MET 112, ALA 146	-
33	Viridiflorol	-6.8	-	PHE 101, TYR 105, MET 112, LEU 134, ALA 146, PHE 150	-
34	Furanodiene	-6.8	-	PHE 101, TYR 105, MET 112, LEU 134, ALA 146	ASP 108 (Pi-Anion)
35	alpha-Curcumene	-6.8	-	PHE 109, MET 112, LEU 134, ALA 146, VAL 153	PHE 101 (Pi-Pi T-shaped), TYR 105 (Pi-Pi T-shaped, Pi-Sigma)
36	beta-Elemene	-6.7	-	PHE 101, ALA 146, VAL 153	-

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
37	Germacrone	-6.7	-	PHE 101, MET 112, LEU 134, ALA 146	-
38	beta-Patchoulene	-6.7	-	LEU 134, ALA 146	-
39	Bisabolene	-6.7	-	PHE 101, MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146	TYR 105 (Pi-Sigma)
40	2-Methoxy-6-(1-methyl-2-propen-1-yl)naphthalene	-6.7	-	TYR 105, MET 112, LEU 134, ALA 146, VAL 153	PHE 101 (Pi-Pi T-shaped)
41	2-(2'-Hydroxyphenoxy)anisole	-6.7	-	MET 112, ALA 146	LEU 134 (Pi-Sigma)
42	Curzerene	-6.6	-	ALA 97, VAL 145	TYR 199 (Pi-Pi Stacked)

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
43	(-)-beta-Elemene	-6.6	-	PHE 101, ALA 146, VAL 153	-
44	alpha-Bergamotene	-6.6	-	PHE 101, PHE 109, MET 112, ALA 146	TYR 105 (Pi-Sigma)
45	alpha,4-Dimethyl-alpha-(4-methylpentyl)benzene methanol	-6.6	-	MET 112, ALA 146	PHE 101 (Pi-Pi T-shaped), TYR 105 (Pi-Pi T-shaped, Pi-Sigma)
46	Curzerenone	-6.5	HIS 181	PHE 127, ALA 128	-
47	(-)-gamma-Elemene	-6.5	-	PHE 101, PHE 109, ALA 146, VAL 153	-
48	alpha-Ionone	-6.5	-	LEU 134, ALA 146	PHE 150 (Ikatan Hidrogen Karbon)
49	beta-Elemenone	-6.5	-	PHE 101, MET 112, LEU 134, ALA 146	-

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
50	5-epi-Curzerenone	-6.5	HIS 181	PHE 127, ALA 128	-
51	Farnesal	-6.2	-	PHE 101, PHE 109, MET 112, LEU 134, ALA 146, VAL 153	-
52	alpha-terpineol acetate	-6.2	-	PHE 101, PHE 109, MET 112, ALA 146, VAL 153	LEU 134 (Ikatan Hidrogen Karbon)
53	(2E,6Z)-Farnesol	-6.2	-	PHE 101, PHE 109, MET 112, LEU 134, ALA 146, VAL 153	-
54	trans-Sabinyol acetate	-6.2	-	PHE 101, ALA 146	-
55	delta-Elemene	-6.1	-	ALA 97, VAL 145	TYR 199 (Pi-Sigma)

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
56	3-Carene	-6	-	PHE 101, PHE 109, MET 112, VAL 153	-
57	beta-Phellandrene	-6	-	MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146	-
58	p-Cymen-8-ol	-6	-	VAL 130, LEU 134, ALA 146	MET 112 (Pi-Sigma)
59	cis-Sabinene hydrate	-5.9	-	MET 112	-
60	p-Cymene	-5.9	-	PHE 101, PHE 109, VAL 130, LEU 134, ALA 146	MET 112 (Pi-Sulfur), PHE 150 (Pi-Sigma)
61	alpha-Phellandrene	-5.9	-	MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146	-

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
62	E-beta-farnesene	-5.9	-	PHE 101, TYR 105, PHE 109, ARG 143, ALA 146, VAL 153	-
63	Myrtenol	-5.9	-	PHE 101, MET 112, ALA 146	-
64	alpha-Pinene	-5.8	-	PHE 101, MET 112, ALA 146	-
65	beta-Thujone	-5.8	-	MET 112, LEU 134, ALA 146	-
66	alpha-Terpinene	-5.8	-	PHE 101, PHE 109, LEU 134, ALA 146, VAL 153	-
67	Perillene	-5.8	-	MET 112, VAL 130, LEU 134	MET 112 (Pi-Pi T-shaped), ALA 146 (Ikatan Hidrogen Karbon

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
68	2-(4-Methyl-3-cyclohexen-1-yl)-1-propen-1-ol	-5.8	-	MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146	-
69	1,8-Cineole	-5.7	-	PHE 101, MET 112, ALA 146	-
70	beta-Pinene	-5.7	-	PHE 101, MET 112, ALA 146	-
71	Limonene	-5.7	-	PHE 109, MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146, VAL 153	-
72	Camphene	-5.7	-	PHE 101, MET 112, VAL 153	-
73	linalool	-5.7	-	PHE 109, MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146, VAL 153, PHE 150	-

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
74	gamma-Terpinene	-5.7	-	PHE 109, LEU 134, ALA 146, VAL 153	PHE 101 (Pi-Pi T-shaped)
75	p-Menth-1-en-9-ol	-5.7	-	MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146	-
76	1-p-Menthene	-5.7	-	MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146, VAL 153	-
77	2,6-Dimethyl-2,4,6-octatriene	-5.7	-	TYR 7, ILE 12, VAL 90, HIS 91, TRP 192, VAL 196	-
78	3-Methylcamphenilol	-5.7	-	PHE 101, PHE 109, MET 112, VAL 153	-
79	cis-Citral	-5.6	-	PHE 109, MET 112, LEU 134, ALA 146, VAL 153	-

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
80	Norbornyl acetate	-5.6	-	MET 112, VAL 153	-
82	(+)-Camphor	-5.5	ARG 124	-	-
83	beta-Myrcene	-5.5	-	PHE 101, PHE 109, MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146, VAL 153	-
84	trans-beta-Ocimene	-5.5	-	PHE 101, PHE 109, MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146, VAL 153	-
85	Teresantanane	-5.5	-	MET 112, ALA 146	-
86	Citral	-5.5	-	PHE 109, MET 112, LEU 134, ALA 146, VAL 153	

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
87	Ethyl benzyl ether	-5.5	-	MET 112, ALA 146	PHE 101 (Pi-Pi T-shaped)
88	cis-beta-Ocimene	-5.4	-	PHE 101, PHE 109, MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146, VAL 153	-
89	Octadecane	-5.4	-	PHE 101, TYR 105, PHE 109, MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146	-
90	2-(4-Methylcyclohex-1-en-1-yl)propan-1-ol	-5.4	-	ALA 128, TYR 177	-
91	2-Methyl-6-methylene-1,7-octadien-3-one	-5.4	-	PHE 101, LEU 134, ALA 146	-
92	Borneol	-5.3	ASP 108	MET 112, LEU 134, ALA 146	-

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
93	Lavandulol	-5.3	-	PHE 101, PHE 109, MET 112, LEU 134, ALA 146, VAL 153	-
94	(E)-Ocimene	-5.3	-	PHE 101, PHE 109, MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146, VAL 153	-
95	Isoborneol	-5.3	-	MET 112, LEU 134, ALA 146	-
96	cis-ocimene	-5.3	-	PHE 101, PHE 109, MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146, VAL 153	-
97	Dihydromyrcenol	-5.3	-	PHE 101, MET 112, LEU 134, ALA 146	-

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
98	Citronellal	-5.2	-	PHE 101, VAL 130, LEU 134	-
99	Amadaldehyde	-5.2	-	ALA97, PHE101, ARG104, TYR105, PHE109, MET112, LEU134, VAL145, ALA146, VAL153,	TYR 199 (Pi-Sigma), GLY 200 (Ikatan Karbon Hidrogen)
100	2,6-Dimethyl-5-heptenal	-5.2	-	MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146	-
101	2-Nonanone	-5	-	MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146	-

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
102	Heptadecane	-5	-	PHE 101, TYR 105, PHE 109, MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146, PHE150, VAL153	-
103	2-Undecanone	-5	-	PHE 101, TYR 105, MET 112, LEU 134, ALA 146	-
104	Hexadecane	-5	-	PHE 101, MET 112, LEU 134, ARG 143, ALA 146, PHE 150	-
105	Hept-1-enyl acetate	-5	-	VAL 130, LEU 134, ALA 146	-

LAMPIRAN 5 (LANJUTAN)

Tabel VII. 1
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Energi Bebas (ΔG) (kkal/mol)	Ikatan Hidrogen	Interaksi Hidrofobik	Interaksi Lain
				Pi-alkyl/alkyl	
106	Undecanal	-4.9	-	PHE 101, LEU 134, ALA 146	-
107	2-Nonanol	-4.9	-	PHE 101, MET 112, LEU 134, ALA 146	-
108	2-Methylheptan-3-ol	-4.8	-	PHE 101, MET 112, VAL 130, LEU 134, ALA 146, PHE 150	-
109	Non-2-en-4-one	-4.8	-	PHE 109, LEU 134, ALA 146, VAL 153	-

LAMPIRAN 6

HASIL ANALISIS SIFAT FISIKOKIMIA

Tabel VII. 2

Hasil Analisis Sifat Fisikokimia Senyawa Aktif Tanaman Temu Mangga
(*Curcuma amada*) Berdasarkan Aturan *Lipinski's Rule of Five*

No	Senyawa/Ligan	BM < 500	H-Donor < 5	H-Akseptor < 10	LogP < 5	Molar Refractivity 40 - 130	Memenuhi Syarat/Tidak
	5-FU	130	2	4	-0.36	25.87	Tidak
1	1,8-Cineole	154	0	1	2.60	45.48	Memenuhi
2	Espatulenol	220	1	1	3.39	65.97	Memenuhi
3	gamma-Eudesmol	222	1	1	4.06	68.30	Memenuhi
4	alpha-Pinene	136	0	0	3.00	43.75	Memenuhi
5	beta-Pinene	136	0	0	3.00	43.75	Memenuhi
6	(+)-Camphor	152	0	1	2.40	44.24	Memenuhi
7	Limonene	136	0	0	3.31	45.91	Memenuhi
8	cis-Sabinene hydrate	154	1	1	2.19	45.24	Memenuhi
9	beta-Thujone	152	0	1	2.26	44.17	Memenuhi
10	3-Carene	136	0	0	3.00	43.75	Memenuhi
11	cis-beta-Ocimene	136	0	0	3.47	48.00	Memenuhi
12	beta-Myrcene	136	0	0	3.47	48.00	Memenuhi
13	trans-beta-Ocimene	136	0	0	3.47	48.00	Memenuhi
14	Borneol	154	1	1	2.19	45.24	Memenuhi
15	Camphene	136	0	0	3.00	43.75	Memenuhi
16	cis-Citral	152	0	1	2.88	48.49	Memenuhi
17	p-Cymene	134	0	0	3.12	45.27	Memenuhi

LAMPIRAN 6 (LANJUTAN)

Tabel VII. 2
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	BM < 500	H- Donor < 5	H- Akseptor < 10	LogP < 5	Molar Refractivity 40 - 130	Memenuhi Syarat/Tidak
18	linalool	154	1	1	2.67	49.49	Memenuhi
19	alpha-Phellandrene	136	0	0	3.16	45.84	Memenuhi
20	alpha-Terpinene	136	0	0	3.31	45.91	Memenuhi
21	gamma-Terpinene	136	0	0	3.31	45.91	Memenuhi
22	beta-Caryophyllene	204	0	0	4.73	66.74	Memenuhi
23	beta-Cubebene	204	0	0	4.27	66.51	Memenuhi
24	E-beta-farnesene	206	0	0	5.43	71.09	Tidak
25	Ledol	222	1	1	3.47	66.00	Memenuhi
26	beta-Eudesmene	204	0	0	4.73	66.74	Memenuhi
27	alpha-Zingiberene	204	0	0	4.89	68.83	Memenuhi
28	beta-Elemene	204	0	0	4.75	68.76	Memenuhi
29	Perillene	150	0	1	3.18	46.46	Memenuhi
30	beta-Phellandrene	136	0	0	3.16	45.84	Memenuhi
31	p-Menth-1-en-9-ol	154	1	1	2.36	47.35	Memenuhi
32	Teresantanane	136	0	0	2.69	41.60	Memenuhi
33	beta-Bisabolol	222	1	1	4.23	70.39	Memenuhi
34	(-)-Curcuphenol	218	1	1	4.55	69.92	Memenuhi
35	(+)-ar-Turmerone	216	0	1	4.02	68.65	Memenuhi
36	beta-Curcumene	204	0	0	5.04	68.09	Tidak

LAMPIRAN 6
(LANJUTAN)

Tabel VII. 2
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	BM < 500	H- Donor < 5	H- Akseptor < 10	LogP < 5	Molar Refractivity 40 - 130	Memenuhi Syarat/Tidak
37	(-)-Germacrene D	204	0	0	4.89	68.83	Memenuhi
38	Germacrone	218	0	1	4.36	69.36	Memenuhi
39	Curzerenone	230	0	2	3.48	67.15	Memenuhi
40	delta-Elemene	204	0	0	4.75	68.76	Memenuhi
41	(-)-gamma-Elemene	204	0	0	4.89	68.83	Memenuhi
42	Curzerene	216	0	1	4.07	67.46	Memenuhi
43	Furanodienon	230	0	2	3.99	68.22	Memenuhi
44	Furanogermenone	232	0	2	3.39	67.08	Memenuhi
45	Humulene 1,2- epoxide	220	0	1	4.25	68.42	Memenuhi
46	Zerumbone	218	0	1	4.21	69.29	Memenuhi
47	(-)-beta- Caryophyllene epoxide	220	0	1	3.94	66.26	Memenuhi
48	(+)-beta-Costol	220	1	1	3.70	68.15	Memenuhi
49	epi-alpha-Cadinol	222	1	1	3.78	68.16	Memenuhi
50	14-Hydroxy alpha- muurolene	220	1	1	3.55	68.08	Memenuhi
51	tau-Muurolol	222	1	1	3.78	68.16	Memenuhi
52	Curcumenol	234	1	2	3.18	67.40	Memenuhi

LAMPIRAN 6 (LANJUTAN)

Tabel VII. 2
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	BM < 500	H- Donor < 5	H- Akseptor < 10	LogP < 5	Molar Refractivity 40 - 130	Memenuhi Syarat/Tidak
53	Viridiflorol	222	1	1	3.47	66.00	Memenuhi
54	allo- Aromadendrene	204	0	0	4.27	64.51	Memenuhi
55	beta-Patchoulene	204	0	0	4.56	64.65	Memenuhi
56	2-Nonanone	142	0	1	2.94	44.06	Memenuhi
57	4-Terpineol	154	1	1	2.50	47.40	Memenuhi
58	(-)-alpha-Selinene	204	0	0	4.73	66.74	Memenuhi
59	alpha-Terpineol	154	1	1	2.50	47.40	Memenuhi
60	Farnesal	220	0	1	4.60	71.48	Memenuhi
61	Furanodiene	216	0	1	4.36	67.60	Memenuhi
62	gamma-Cadinene	204	0	0	4.58	66.67	Memenuhi
63	Heptadecane	240	0	0	6.88	80.60	Tidak
64	2-Undecanone	170	0	1	3.72	53.29	Memenuhi
65	Octadecane	254	0	0	7.27	85.22	Tidak
66	p-Cymen-8-ol	150	1	1	2.22	46.42	Memenuhi
67	Undecanal	170	0	1	3.72	53.29	Memenuhi
68	beta-Gurjunene	204	0	0	4.27	64.51	Memenuhi
69	Lavandulol	154	1	1	2.53	49.44	Memenuhi
70	(E)-Ocimene	136	0	0	3.47	48.00	Memenuhi

LAMPIRAN 6 (LANJUTAN)

Tabel VII. 2
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	BM < 500	H- Donor < 5	H- Akseptor < 10	LogP < 5	Molar Refractivity 40 - 130	Memenuhi Syarat/Tidak
71	alpha-terpineol acetate	196	0	2	3,07	56,94	Memenuhi
72	Hexadecane	226	0	0	6,49	76,00	Tidak
73	Citral	152	0	1	2,88	48,49	Memenuhi
74	Citronellal	154	0	1	2,96	48,51	Memenuhi
75	(-)-beta-Elemene	204	0	0	4,75	68,76	Memenuhi
76	Myrtenol	152	1	1	1,97	45,16	Memenuhi
77	alpha-Curcumene	202	0	0	4,84	68,26	Memenuhi
78	1-p-Menthene	138	0	0	3.39	45,94	Memenuhi
79	2,6-Dimethyl-2,4,6- octatriene	136	0	0	3.47	48,00	Memenuhi
80	alpha-Bergamotene	204	0	0	4.73	66,74	Memenuhi
81	beta-Copaene	204	0	0	4.27	64,51	Memenuhi
82	beta-Terpineol	154	1	1	2.50	47,40	Memenuhi
83	Bisabolene	204	0	0	5.18	68,97	Tidak
84	Isoborneol	154	1	1	2.19	45,24	Memenuhi
85	alpha-Ionone	192	0	1	3.51	60,08	Memenuhi
86	(2E,6Z)-Farnesol	222	1	1	4.40	72,50	Memenuhi
87	beta-Elementone	218	0	1	4.07	69,22	Memenuhi

LAMPIRAN 6 (LANJUTAN)

Tabel VII. 2
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	BM < 500	H- Donor < 5	H- Akseptor < 10	LogP < 5	Molar Refractivity 40 - 130	Memenuhi Syarat/Tidak
88	3-Methylcamphenilol	154	1	1	2.19	45.24	Memenuhi
89	cis-ocimene	136	0	0	3.47	48.00	Memenuhi
90	5-epi-Curzerenone	230	0	2	3.48	67.15	Memenuhi
91	Amadaldehyde	930	0	2	22.01	301.07	Tidak
92	Amadannulen	376	1	3	5.66	109.25	Tidak
93	1-Pentadecanol	228	1	1	5.07	72.78	Tidak
94	2-(4-Methyl-3-cyclohexen-1-yl)-1-propen-1-ol	152	1	1	3.19	47.48	Memenuhi
95	2,6-Dimethyl-5-heptenal	140	0	1	2.57	43.89	Memenuhi
96	trans-Sabinyl acetate	194	0	2	2.54	54.69	Memenuhi
97	2-(4-Methylcyclohex-1-en-1-yl)propan-1-ol	154	1	1	2.36	47.35	Memenuhi
98	2-Methylheptan-3-ol	130	1	1	2.19	40.40	Memenuhi
99	2-Methoxy-6-(1-methyl-2-propen-1-yl)naphthalene	212	0	1	4.13	69.11	Memenuhi

LAMPIRAN 6 (LANJUTAN)

Tabel VII. 2
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	BM < 500	H- Donor < 5	H- Akseptor < 10	LogP < 5	Molar Refractivity 40 - 130	Memenuhi Syarat/Tidak
100	2-(2'-Hydroxyphenoxy)anisole	216	1	3	2.76	61.05	Memenuhi
101	Patchoulane	206	0	0	4.50	64.61	Memenuhi
102	Non-2-en-4-one	140	0	1	2.71	43.96	Memenuhi
103	Norbornyl acetate	154	0	2	1.74	41.00	Memenuhi
104	Hept-1-enyl acetate	156	0	2	2.64	45.05	Memenuhi
105	2-Methyl-6-methylene-1,7-octadien-3-one	150	0	1	2.65	48.39	Memenuhi
106	Dihydromyrcenol	156	1	1	2.75	49.51	Memenuhi
107	Ethyl benzyl ether	136	0	1	2.22	41.77	Memenuhi
108	2-Nonanol	144	1	1	2.73	45.06	Memenuhi
109	alpha,4-Dimethyl-alpha-(4-methylpentyl)benzenemethanol	220	1	1	4.03	69.44	Memenuhi

LAMPIRAN 7

HASIL ANALISIS FARMAKOKINETIKA

Tabel VII. 3

Hasil Analisis Farmakokinetika Senyawa Aktif Tanaman Temu Mangga
(*Curcuma amada*) Berdasarkan *Pre-ADMET*

No	Senyawa/Ligan	Absorpsi		Distribusi
		CaCo-2 Cell (nm/sec)	HIA (%)	PPB (%)
	5-FU	17,25 ^b	75,93 ^a	8,31 ^b
1	1,8-Cineole	58,02 ^b	100 ^a	100 ^a
2	Espatulenol	54,42 ^b	100 ^a	82,89 ^b
3	gamma-Eudesmol	55,65 ^b	100 ^a	100 ^a
4	alpha-Pinene	23,63 ^b	100 ^a	100 ^a
5	beta-Pinene	23,49 ^b	100 ^a	100 ^a
6	(+)-Camphor	26,82 ^b	100 ^a	100 ^a
7	Limonene	23,63 ^b	100 ^a	100 ^a
8	cis-Sabinene hydrate	49,55 ^b	100 ^a	35,94 ^b
9	beta-Thujone	33,77 ^b	100 ^a	66,76 ^b
10	3-Carene	23,63 ^b	100 ^a	100 ^a
11	cis-beta-Ocimene	23,66 ^b	100 ^a	100 ^a
12	beta-Myrcene	23,63 ^b	100 ^a	100 ^a
13	trans-beta-Ocimene	23,63 ^b	100 ^a	100 ^a
14	Borneol	24,23 ^b	100 ^a	100 ^a
15	Camphene	23,49 ^b	100 ^a	100 ^a
16	cis-Citral	13,20 ^b	100 ^a	100 ^a
17	p-Cymene	23,43 ^b	100 ^a	100 ^a

LAMPIRAN 7 (LANJUTAN)

Tabel VII. 3
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Absorpsi		Distribusi
		CaCo-2 Cell (nm/sec)	HIA (%)	PPB (%)
18	linalool	29,36 ^b	100 ^a	100 ^a
19	alpha-Phellandrene	23,42 ^b	100 ^a	100 ^a
20	alpha-Terpinene	23,46 ^b	100 ^a	100 ^a
21	gamma-Terpinene	23,64 ^b	100 ^a	100 ^a
22	beta-Caryophyllene	23,63 ^b	100 ^a	100 ^a
23	beta-Cubebene	23,49 ^b	100 ^a	94,09 ^a
24	E-beta-farnesene	23,41 ^b	100 ^a	100 ^a
25	Ledol	54,57 ^b	100 ^a	100 ^a
26	beta-Eudesmene	23,49 ^b	100 ^a	100 ^a
27	alpha-Zingiberene	23,40 ^b	100 ^a	100 ^a
28	beta-Elemene	23,49 ^b	100 ^a	100 ^a
29	Perillene	57,76 ^b	100 ^a	100 ^a
30	beta-Phellandrene	23,42 ^b	100 ^a	91,20 ^a
31	p-Menth-1-en-9-ol	22,22 ^b	100 ^a	64,97 ^b
32	Teresantanane	22,31 ^b	100 ^a	100 ^a
33	beta-Bisabolol	51,11 ^b	100 ^a	100 ^a
34	(-)-Curcuphenol	52,38 ^b	100 ^a	100 ^a
35	(+)-ar-Turmerone	55,50 ^b	100 ^a	100 ^a

LAMPIRAN 7 (LANJUTAN)

Tabel VII. 3
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Absorpsi		Distribusi
		CaCo-2 Cell (nm/sec)	HIA (%)	PPB (%)
36	beta-Curcumene	23,41 ^b	100 ^a	100 ^a
37	(-)-Germacrene D	23,63 ^b	100 ^a	100 ^a
38	Germacrone	55,88 ^b	100 ^a	100 ^a
39	Curzerenone	55,49 ^b	100 ^a	100 ^a
40	delta-Elemene	23,64 ^b	100 ^a	100 ^a
41	(-)-gamma-Elemene	23,49 ^b	100 ^a	100 ^a
42	Curzerene	57,02 ^b	100 ^a	100 ^a
43	Furanodienon	56,09 ^b	100 ^a	100 ^a
44	Furanogermenone	56,13 ^b	100 ^a	100 ^a
45	Humulene 1,2-epoxide	52,27 ^b	100 ^a	100 ^a
46	Zerumbone	55,36 ^b	100 ^a	100 ^a
47	(-)-beta-Caryophyllene epoxide	56,35 ^b	100 ^a	90,85 ^a
48	(+)-beta-Costol	18,49 ^b	100 ^a	100 ^a
49	epi-alpha-Cadinol	55,41 ^b	100 ^a	100 ^a
50	14-Hydroxy alpha-muurolene	23,06 ^b	100 ^a	98,20 ^a
51	tau-Muurolol	55,41 ^b	100 ^a	100 ^a
52	Curcumenol	52,94 ^b	97,13 ^a	100 ^a
53	Viridiflorol	54,57 ^b	100 ^a	100 ^a

LAMPIRAN 7 (LANJUTAN)

Tabel VII. 3
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Absorpsi		Distribusi
		CaCo-2 Cell (nm/sec)	HIA (%)	PPB (%)
54	allo-Aromadendrene	55,95 ^b	100 ^a	100 ^a
55	beta-Patchoulene	22,32 ^b	100 ^a	100 ^a
56	2-Nonanone	26,76 ^b	100 ^a	100 ^a
57	4-Terpineol	50,81^b	100^a	100^a
58	(-)-alpha-Selinene	23,63 ^b	100 ^a	100 ^a
59	alpha-Terpineol	50,81^b	100^a	23,42^b
60	Farnesal	37,75 ^b	100 ^a	100 ^a
61	Furanodiene	52,25 ^b	100 ^a	100 ^a
62	gamma-Cadinene	23,63 ^b	100 ^a	100 ^a
63	Heptadecane	22,19 ^b	100 ^a	100 ^a
64	2-Undecanone	44,90 ^b	100 ^a	100 ^a
65	Octadecane	22,19 ^b	100 ^a	100 ^a
66	p-Cymen-8-ol	50,52 ^b	100 ^a	51,14 ^b
67	Undecanal	44,41 ^b	100 ^a	100 ^a
68	beta-Gurjunene	23,49 ^b	100 ^a	100 ^a
69	Lavandulol	24,62 ^b	100 ^a	100 ^a
70	(E)-Ocimene	23,63 ^b	100 ^a	100 ^a
71	alpha-terpineol acetate	37,77 ^b	100 ^a	98,54 ^a

LAMPIRAN 7 (LANJUTAN)

Tabel VII. 3
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Absorpsi		Distribusi
		CaCo-2 Cell (nm/sec)	HIA (%)	PPB (%)
72	Hexadecane	22,19 ^b	100 ^a	100 ^a
73	Citral	13,97 ^b	100 ^a	100 ^a
74	Citronellal	13,73 ^b	100 ^a	100 ^a
75	(-)-beta-Elemene	23,49 ^b	100 ^a	100 ^a
76	Myrtenol	21,46 ^b	100 ^a	35,77 ^b
77	alpha-Curcumene	23,40 ^b	100 ^a	100 ^a
78	1-p-Menthene	23,63 ^b	100 ^a	100 ^a
79	2,6-Dimethyl-2,4,6-octatriene	23,45 ^b	100 ^a	98,87 ^a
80	alpha-Bergamotene	23,41 ^b	100 ^a	100 ^a
81	beta-Copaene	23,49 ^b	100 ^a	100 ^a
82	beta-Terpineol	50,81^b	100^a	22,00^b
83	Bisabolene	23,41 ^b	100 ^a	99,58 ^a
84	Isoborneol	24,23 ^b	100 ^a	100 ^a
85	alpha-Ionone	53,02 ^b	100 ^a	99,47 ^a
86	(2E,6Z)-Farnesol	32,00 ^b	100 ^a	100 ^a
87	beta-Elemenone	52,84 ^b	100 ^a	95,45 ^a
88	3-Methylcamphenilol	40,48 ^b	100 ^a	100 ^a
89	cis-ocimene	23,63 ^b	100 ^a	100 ^a

LAMPIRAN 7
(LANJUTAN)

Tabel VII. 3
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Absorpsi		Distribusi
		CaCo-2 Cell (nm/sec)	HIA (%)	PPB (%)
90	5-epi-Curzerenone	55,49 ^b	100 ^a	100 ^a
91	Amadaldehyde	51,81 ^b	100 ^a	93,57 ^a
92	Amadannulen	32,34 ^b	95,57 ^a	100 ^a
93	1-Pentadecanol	42,11^b	100^a	100^a
94	2-(4-Methyl-3-cyclohexen-1-yl)-1-propen-1-ol	22,19 ^b	100 ^a	92,05 ^a
95	2,6-Dimethyl-5-heptenal	30,00 ^b	100 ^a	100 ^a
96	trans-Sabinyll acetate	47,26 ^b	100 ^a	82,96 ^a
97	2-(4-Methylcyclohex-1-en-1-yl)propan-1-ol	22,22 ^b	100 ^a	100 ^a
98	2-Methylheptan-3-ol	21,12 ^b	100 ^a	100 ^a
99	2-Methoxy-6-(1-methyl-2-propen-1-yl)naphthalene	55,92 ^b	100 ^a	94,79 ^a
100	2-(2'-Hydroxyphenoxy)anisole	53,74 ^b	95,30 ^a	96,34 ^a
101	Patchoulane	22,30 ^b	100 ^a	100 ^a
102	Non-2-en-4-one	53,47 ^b	100 ^a	100 ^a
103	Norbornyl acetate	31,24 ^b	100 ^a	95,00 ^a
104	Hept-1-enyl acetate	51,35 ^b	100 ^a	100 ^a

LAMPIRAN 7 (LANJUTAN)

Tabel VII. 3
Lanjutan

No	Senyawa/Ligan	Absorpsi		Distribusi
		CaCo-2 Cell (nm/sec)	HIA (%)	PPB (%)
10	2-Methyl-6-methylene-1,7-octadien-3-one	56,07 ^b	100 ^a	66,89 ^b
106	Dihydromyrcenol	29,36 ^b	100 ^a	100 ^a
107	Ethyl benzyl ether	57,33 ^b	100 ^a	43,87 ^b
108	2-Nonanol	22,12 ^b	100 ^a	100 ^a
109	alpha,4-Dimethyl-alpha-(4-methylpentyl)benzenemethanol	51,09 ^b	100 ^a	100 ^a

Keterangan:

- CaCo-2 Cell (nm/sec) : > 70 permeabilitas tinggi^a
4 – 70 permeabilitas sedang^b
< 4 permeabilitas rendah^c
- *Human Intestinal Absorption* : 70 – 100 terserap baik^a
(HIA) (%) 20 – 70 terserap cukup^b
< 20 kurang terserap^c
- *Plasma Protein Binding* : > 90 terikat baik^a
(PPB) (%) < 90 terikat lemah^b

LAMPIRAN 8

HASIL ANALISIS TOKSISITAS

Tabel VII. 4

Hasil Analisis Toksisitas Senyawa Aktif Tanaman Temu Mangga (*Curcuma amada*) Berdasarkan *Toxtree*

No	Ligan	Kroes TTC	Karsinogenik		Mutagen (Amest Test)
			Genotoksik	Non Genotoksik	
	5-FU	Tidak Berisiko	-	-	-
1	1,8-Cineole	Tidak Berisiko	-	-	-
2	Espatulenol	Tidak Berisiko	-	-	-
3	gamma-Eudesmol	Tidak Berisiko	-	-	-
4	alpha-Pinene	Tidak Berisiko	-	-	-
5	beta-Pinene	Tidak Berisiko	-	-	-
6	(+)-Camphor	Tidak Berisiko	-	-	-
7	Limonene	Tidak Berisiko	-	-	-
8	cis-Sabinene hydrate	Tidak Berisiko	-	-	-
9	beta-Thujone	Tidak Berisiko	-	-	-
10	3-Carene	Tidak Berisiko	-	-	-

LAMPIRAN 8 (LANJUTAN)

Tabel VII. 4
Lanjutan

No	Ligan	Kroes <i>TTC</i>	Karsinogenik		Mutagen (Amest Test)
			Genotoksik	Non Genotoksik	
11	cis-beta-Ocimene	Tidak Berisiko	-	-	-
12	beta-Myrcene	Tidak Berisiko	-	-	-
13	trans-beta-Ocimene	Tidak Berisiko	-	-	-
14	Borneol	Tidak Berisiko	-	-	-
15	Camphene	Tidak Berisiko	-	-	-
16	cis-Citral	Berisiko Rendah	+	-	+
17	p-Cymene	Tidak Berisiko	-	-	-
18	linalool	Tidak Berisiko	-	-	-
19	alpha-Phellandrene	Tidak Berisiko	-	-	-
20	alpha-Terpinene	Tidak Berisiko	-	-	-
21	gamma-Terpinene	Tidak Berisiko	-	-	-

LAMPIRAN 8 (LANJUTAN)

Tabel VII. 4
Lanjutan

No	Ligan	Kroes <i>TTC</i>	Karsinogenik		Mutagen (Amest Test)
			Genotoksik	Non Genotoksik	
22	beta-Caryophyllene	Tidak Berisiko	-	-	-
23	beta-Cubebene	Tidak Berisiko	-	-	-
24	E-beta-farnesene	Tidak Berisiko	-	-	-
25	Ledol	Tidak Berisiko	-	-	-
26	beta-Eudesmene	Tidak Berisiko	-	-	-
27	alpha-Zingiberene	Tidak Berisiko	-	-	-
28	beta-Elemene	Tidak Berisiko	-	-	-
29	Perillene	Tidak Berisiko	-	-	-
30	beta-Phellandrene	Tidak Berisiko	-	-	-
31	p-Menth-1-en-9-ol	Tidak Berisiko	-	-	-
32	Teresantanane	Tidak Berisiko	-	-	-

LAMPIRAN 8 (LANJUTAN)

Tabel VII. 4
Lanjutan

No	Ligan	Kroes TTC	Karsinogenik		Mutagen (Amest Test)
			Genotoksik	Non Genotoksik	
33	beta-Bisabolol	Tidak Berisiko	-	-	-
34	(-)-Curcuphenol	Tidak Berisiko	-	-	-
35	(+)-ar-Turmerone	Berisiko Rendah	+	-	+
36	beta-Curcumene	Tidak Berisiko	-	-	-
37	(-)-Germacrene D	Tidak Berisiko	-	-	-
38	Germacrone	Berisiko Rendah	+	-	+
39	Curzerenone	Tidak Berisiko	-	-	-
40	delta-Elemene	Tidak Berisiko	-	-	-
41	(-)-gamma-Elemene	Tidak Berisiko	-	-	-
42	Curzerene	Tidak Berisiko	-	-	-
43	Furanodienon	Berisiko Rendah	+	-	+

LAMPIRAN 8 (LANJUTAN)

Tabel VII. 4
Lanjutan

No	Ligan	Kroes <i>TTC</i>	Karsinogenik		Mutagen (Amest Test)
			Genotoksik	Non Genotoksik	
44	Furanogermenone	Tidak Berisiko	-	-	-
45	Humulene 1,2- epoxide	Berisiko Rendah	+	-	+
46	Zerumbone	Berisiko Rendah	+	-	+
47	(-)-beta- Caryophyllene epoxide	Berisiko Rendah	+	-	+
48	(+)-beta-Costol	Tidak Berisiko	-	-	-
49	epi-alpha-Cadinol	Tidak Berisiko	-	-	-
50	14-Hydroxy alpha- muurolene	Tidak Berisiko	-	-	-
51	tau-Muurolol	Tidak Berisiko	-	-	-
52	Curcumenol	Tidak Berisiko	-	-	-
53	Viridiflorol	Tidak Berisiko	-	-	-
54	allo-Aromadendrene	Tidak Berisiko	-	-	-

LAMPIRAN 8 (LANJUTAN)

Tabel VII. 4
Lanjutan

No	Ligan	Kroes <i>TTC</i>	Karsinogenik		Mutagen (Amest Test)
			Genotoksik	Non Genotoksik	
55	beta-Patchoulene	Tidak Berisiko	-	-	-
56	2-Nonanone	Tidak Berisiko	-	-	-
57	4-Terpineol	Tidak Berisiko	-	-	-
58	(-)-alpha-Selinene	Tidak Berisiko	-	-	-
59	alpha-Terpineol	Tidak Berisiko	-	-	-
60	Farnesal	Berisiko Rendah	+	-	+
61	Furanodiene	Tidak Berisiko	-	-	-
62	gamma-Cadinene	Tidak Berisiko	-	-	-
63	Heptadecane	Tidak Berisiko	-	-	-
64	2-Undecanone	Tidak Berisiko	-	-	-
65	Octadecane	Tidak Berisiko	-	-	-

LAMPIRAN 8 (LANJUTAN)

Tabel VII. 4
Lanjutan

No	Ligan	Kroes TTC	Karsinogenik		Mutagen (Amest Test)
			Genotoksik	Non Genotoksik	
66	p-Cymen-8-ol	Tidak Berisiko	-	-	-
67	Undecanal	Berisiko Rendah	+	-	+
68	beta-Gurjunene	Tidak Berisiko	-	-	-
69	Lavandulol	Tidak Berisiko	-	-	-
70	(E)-Ocimene	Tidak Berisiko	-	-	-
71	alpha-terpineol acetate	Tidak Berisiko	-	-	-
72	Hexadecane	Tidak Berisiko	-	-	-
73	Citral	Berisiko Rendah	+	-	+
74	Citronellal	Berisiko Rendah	+	-	+
75	(-)-beta-Elemene	Tidak Berisiko	-	-	-
76	Myrtenol	Tidak Berisiko	-	-	-

LAMPIRAN 8 (LANJUTAN)

Tabel VII. 4
Lanjutan

No	Ligan	Kroes <i>TTC</i>	Karsinogenik		Mutagen (Amest Test)
			Genotoksik	Non Genotoksik	
77	alpha-Curcumene	Tidak Berisiko	-	-	-
78	1-p-Menthene	Tidak Berisiko	-	-	-
79	2,6-Dimethyl-2,4,6-octatriene	Tidak Berisiko	-	-	-
80	alpha-Bergamotene	Tidak Berisiko	-	-	-
81	beta-Copaene	Tidak Berisiko	-	-	-
82	beta-Terpineol	Tidak Berisiko	-	-	-
83	Bisabolene	Tidak Berisiko	-	-	-
84	Isoborneol	Tidak Berisiko	-	-	-
85	alpha-Ionone	Berisiko Rendah	+	-	+
86	(2E,6Z)-Farnesol	Tidak Berisiko	-	-	-
87	beta-Elemenone	Berisiko Rendah	+	-	+

LAMPIRAN 8 (LANJUTAN)

Tabel VII. 4
Lanjutan

No	Ligan	Kroes <i>TTC</i>	Karsinogenik		Mutagen (Amest Test)
			Genotoksik	Non Genotoksik	
88	3-Methylcamphenilol	Tidak Berisiko	-	-	-
89	cis-ocimene	Tidak Berisiko	-	-	-
90	5-epi-Curzerenone	Tidak Berisiko	-	-	-
91	Amadaldehyde	Berisiko Rendah	+	-	+
92	Amadannulen	Tidak Berisiko	-	-	-
93	1-Pentadecanol	Tidak Berisiko	-	-	-
94	2-(4-Methyl-3-cyclohexen-1-yl)-1-propen-1-ol	Tidak Berisiko	-	-	-
95	2,6-Dimethyl-5-heptenal	Berisiko Rendah	+	-	+
96	trans-Sabinyl acetate	Tidak Berisiko	-	-	-
97	2-(4-Methylcyclohex-1-en-1-yl)propan-1-ol	Tidak Berisiko	-	-	-

LAMPIRAN 8 (LANJUTAN)

Tabel VII. 4
Lanjutan

No	Ligan	Kroes <i>TTC</i>	Karsinogenik		Mutagen (Amest Test)
			Genotoksik	Non Genotoksik	
98	2-Methylheptan-3-ol	Tidak Berisiko	-	+	-
99	2-Methoxy-6-(1-methyl-2-propen-1-yl)naphthalene	Berisiko Rendah	+	-	+
100	2-(2'-Hydroxyphenoxy)anisole	Tidak Berisiko	-	-	-
101	Patchoulane	Tidak Berisiko	-	-	-
102	Non-2-en-4-one	Berisiko Rendah	+	-	+
103	Norbornyl acetate	Tidak Berisiko	-	-	-
104	Hept-1-enyl acetate	Berisiko Rendah	+	-	+
105	2-Methyl-6-methylene-1,7-octadien-3-one	Berisiko Rendah	+	-	+
106	Dihydromyrcenol	Tidak Berisiko	-	-	-
107	Ethyl benzyl ether	Tidak Berisiko	-	-	-

LAMPIRAN 8 (LANJUTAN)

Tabel VII. 4
Lanjutan

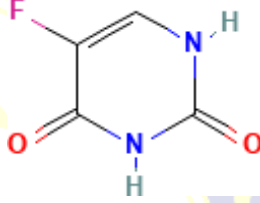
No	Ligan	Kroes <i>TTC</i>	Karsinogenik		Mutagen (<i>Amest Test</i>)
			Genotoksik	Non Genotoksik	
108	2-Nonanol	Tidak Berisiko	-	-	-
109	alpha,4-Dimethyl- alpha-(4- methylpentyl)benzen emethanol	Tidak Berisiko	-	-	-

LAMPIRAN 9

STRUKTUR 2D LIGAN PEMBANDING

Tabel VII. 5

Struktur 2D Ligan Pembanding

LIGAN PEMBANDING	STRUKTUR SENYAWA
5-Fluorourasil	

DAFTAR RIWAYAT HIDUP

I. IDENTITAS DIRI

Nama : R Asri Nurhanifah

Tempat, Tanggal Lahir : Garut, 23 Desember 2023

Jenis Kelamin : Perempuan

Agama : Islam

Kewarganegaraan : Indonesia

Status : Mahasiswa

Alamat : Kp. Pasir Muncang RT 001 RW 006
Ds. Jati Kec. Tarogong Kaler Kab. Garut,
Jawa Barat 44151

Telepon : 088218224731

Email : rasrinurhanifah9htugas@gmail.com

II. RIWAYAT PENDIDIKAN

Jenjang Pendidikan	Nama Sekolah/Perguruan Tinggi	Tahun Masuk	Tahun Lulus
SD/MI	SDN IV Tanjung Kamuning	2007	2013
SMP/MTs	SMPN 1 Tarogong Kaler	2013	2016
SMA/MA/SMK	SMAN 6 Garut	2016	2019
Perguruan Tinggi	Universitas Garut	2019	2023