

DAFTAR ISI

	Halaman
KATA PENGANTAR.....	vi
RINGKASAN.....	viii
ABSTRACT.....	x
DAFTAR ISI	xi
DAFTAR TABEL	xv
DAFTAR GAMBAR.....	xvi
DAFTAR LAMPIRAN.....	xviii
DAFTAR SINGKATAN.....	xix
BAB I. PENDAHULUAN	1
1.1. Latar Belakang	1
1.2. Rumusan Masalah.....	6
1.3. Tujuan Penelitian.....	6
1.4. Manfaat Penelitian.....	7
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA.....	8
2.1. Tinjauan tentang tanaman <i>Justicia gendarussa</i> Burm. f	8
2.1.1 Klasifikasi <i>Justicia gendarussa</i> Burm. f.	8
2.1.2 Morfologi Tanaman.....	9
2.1.3 Penyebaran dan tempat tumbuh.....	10
2.1.4 Kandungan Tanaman.....	10
2.1.5 Kegunaan Tanaman.....	13
2.1.6 Karakteristik Fisika Kimia yang Terisolasi.....	13
2.2. Tinjauan Tentang Flavonoid.....	14
2.2.1 Flavonoid O-Glikosida.....	16
2.2.2 Flavonoid C-Glikosida.....	16
2.2.3 Manfaat Flavonoid.....	16

2.3.	Tinjauan Tentang Alkaloid	19
2.3.1	Manfaat Alkaloid.....	24
2.4.	Tinjauan Tentang Senyawa Beracun.....	28
2.4.1	Tinjauan tentang Senyawa Beracun pada Tumbuhan.....	28
2.4.2	Tinjauan tentang Senyawa Beracun dalam <i>database</i>	30
2.5.	Tinjauan Tentang Uji Toksisitas.....	32
2.5.1	Macam Studi Toksisitas.....	33
2.6.	Penelitian Toksisitas <i>J.gendarussa</i>	37
2.6.1	Penelitian Toksisitas secara <i>in vivo</i>	37
2.6.2	Penelitian Toksisitas secara <i>in vitro</i>	38
2.7.	Studi Toksisitas secara <i>In silico</i>	39
2.8.	Tinjauan Tentang <i>In Silico</i>	40
2.8.1	<i>Ligand Based Methode</i>	41
2.8.2	Program Komputer.....	42
2.9.	Tinjauan Tentang Ikatan Kimia.....	43
2.9.1	Ikatan Kovalen.....	43
2.9.2	Ikatan Ionik.....	44
2.9.3	Ikatan Hidrogen.....	45
2.9.4	Interaksi Ion-Dipol dan Dipol-Dipol.....	46
2.9.5	Ikatan <i>Van der Waal's</i>	46
2.9.6	Ikatan Hidrofob.....	47
2.9.7	Transfer Muatan.....	48
2.10.	Tinjauan tentang Hukum Lima Lipinski.....	50b
BAB III. KERANGKA KONSEPTUAL.....		51
3.1.	Uraian Kerangka Konseptual.....	51

3.2.	Hipotesis.....	53
3.3.	Skema Kerangka Konseptual.....	54
BAB IV. METODOLOGI PENELITIAN		55
4.1.	Bahan dan Alat.....	55
4.1.1	Bahan.....	55
4.1.2	Alat.....	55
4.2.	Metodologi Penelitian.....	56
4.2.1	Preparasi Ligan.....	59
4.2.2	Penentuan Sifat Kimia Fisika Ligan.....	60
4.2.3	Penentuan Toksisitas menggunakan <i>ACD/I-Lab Online</i>	61
4.2.4	Prediksi Absorpsi Menggunakan <i>Osiris Property Explorer Online</i>	62
4.2.5	Prediksi Absorpsi Menggunakan <i>Toxtree Offline</i>	62
4.3.	Skema Kerja.....	64
4.3.1	Penentuan Sifat Kimia Fisika Ligan.....	64
4.3.2	Preparasi Ligan dalam bentuk 3D.....	65
4.3.3	Prediksi Toksisitas Menggunakan <i>ACD/I-Lab Online</i>	66
4.3.4	Prediksi Toksisitas Menggunakan <i>Osiris Property Online</i>	67
4.3.5	Prediksi Toksisitas Menggunakan <i>Toxtree Offline</i>	68
BAB V. HASIL PENGAMATAN.....		69
5.1.	Hasil Pembuatan Struktur 2 Dimensi dan 3 Dimensi....	69
5.2.	Hasil Penentuan Sifat Kimia-Fisika Senyawa	73

5.3.	Prediksi Toksisitas Menggunakan <i>ACD/I-Lab Online</i>	75
5.4.	Prediksi Toksisitas Menggunakan <i>Osiris Property Online</i>	78
5.5.	Prediksi Toksisitas Menggunakan <i>Toxtree Offline</i>	80
5.6.	Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas (Toksisitas) Senyawa.....	82
5.6.1	Persamaan Regresi Hubungan Kuantitatif Struktur-Aktivitas.....	83
BAB VI. PEMBAHASAN.....		85
6.1	Pembahasan.....	85
6.1.1	Prediksi Toksisitas dengan menggunakan <i>ACD/I-Lab Online</i>	86
6.1.2	Prediksi Toksisitas dengan menggunakan <i>Osiris Property Online</i>	89
6.1.3	Prediksi Toksisitas dengan menggunakan <i>Toxtree Offline</i>	90
BAB VII. KESIMPULAN DAN SARAN.....		94
7.1.	Kesimpulan.....	94
7.2.	Saran.....	95
DAFTAR PUSTAKA.....		96
LAMPIRAN.....		102

DAFTAR TABEL

Tabel	Halaman
II.1 Struktur alkaloid yang ditemukan di tanaman.....	20
II.2 Manfaat alkaloid.....	25
II.3 Daftar beberapa senyawa toksik yang terdapat di dalam <i>database</i> program.....	30
II.4 Klasifikasi Zat Kimia Sesuai dengan Toksisitas Relatifnya.....	34
IV.1 Senyawa flavonoid dan alkaloid pada <i>J.gendarussa</i>	56
V.1 Gambar struktur 2D dan 3D kandungan senyawa pada <i>J.gendarussa</i>	67
V.2 Hasil penentuan Energi Minimal dengan <i>MMFF94</i>	71
V.3 Hasil Penentuan Sifat Kimia Fisika.....	74
V.4 Hasil Penentuan menggunakan <i>ACD/I-Lab Online</i>	75
V.5 Hasil Penentuan menggunakan <i>ACD/I-Lab Osiris Property Online</i>	78
V.6 Hasil Penentuan menggunakan <i>Toxtree Offline</i>	80
V.7 Nilai parameter lipofilik, elektronik, sterik dari 13 senyawa pada <i>J. gendarussa</i>	76
V.8 Nilai parameter lipofilik, elektronik, sterik dari 13 senyawa pada <i>J. gendarussa</i>	83

DAFTAR GAMBAR

Gambar		Halaman
2.1	Tanaman <i>Justicia gendarussa</i> Burm f.....	8
2.2	Struktur molekul alkaloid dalam daun <i>J. Gendarussa</i> .	10
2.3	Struktur molekul Alkaloid baru dalam daun <i>J.gendarussa</i>	11
2.4	Beberapa senyawa gendarusin yang termasuk kelompok flavonoid yang ditemukan pada daun <i>J.gendarussa</i>	12
2.5	Sistem Penomoran Turunan flavonoid	15
2.6	Gugus Kation pada asam amino arginin.....	44
2.7	Ikatan Ion.....	45
2.8	Struktur Asam orto-hidroksibenzoat dan Polimer dari asam para-hidroksibenzoat.....	45
2.9	Ikatan hidrogen antara basa komplementer guanin dan sitosin dalam DNA.....	46
2.10	Bentuk siklik metadon yang diakibatkan oleh interaksi dipol-dipol.....	47
2.11	Ikatan Van der Waal's.....	47
2.12	Interaksi melalui transfer muatan.....	49
3.1	Skema Kerangka Konseptual	54
4.1	Bagan prosedur penentuan sifat fisika kimia menggunakan ChemBioDraw Ultra 12.0.....	64
4.2	Bagan prosedur preparasi ligan dalam bentuk 3D.....	65
4.3	Bagan prosedur prediksi toksisitas menggunakan <i>ACD/I-Lab Online</i>	66
4.4	Bagan prosedur prediksi toksisitas menggunakan	

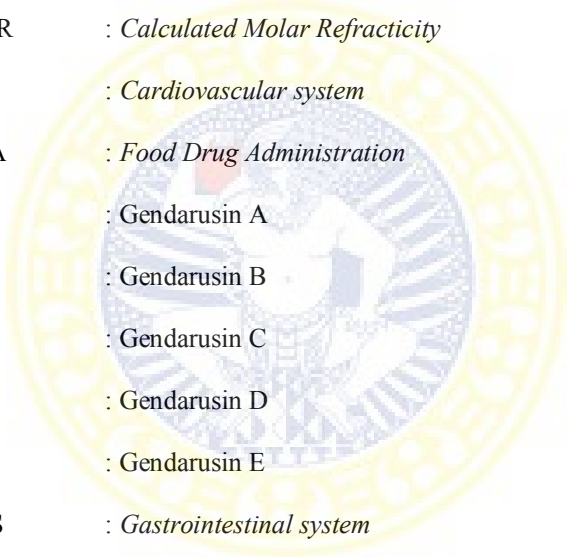
	<i>Osiris Property Explorer Online</i>	67
4.5	Bagan prosedur prediksi toksisitas menggunakan <i>Toxtree Offline</i>	68



DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran	Halaman
Lampiran 1	103
Lampiran 2	104
Lampiran 3	105
Lampiran 4	118
Lampiran 5	131
Lampiran 6	132
Lampiran 7	147
Lampiran 8	148
Lampiran 9	150
Lampiran 10	151
Lampiran 11	154

DAFTAR SINGKATAN



A1	: 2-amino benzil alkohol
A2	: 2-amino-o-metil benzil alkohol
A3	: 2-(2'-amino-benzilamino) benzil alkohol
A4	: 2-(2' amino-benzil)-o-metil-benzil alkohol
BM	: Berat Molekul
CMR	: <i>Calculated Molar Refractivity</i>
CS	: <i>Cardiovascular system</i>
FDA	: <i>Food Drug Administration</i>
GA	: Gendarusin A
GB	: Gendarusin B
GC	: Gendarusin C
GD	: Gendarusin D
GE	: Gendarusin E
GI S	: <i>Gastrointestinal system</i>
HIV	: <i>Human Immunodeficiency Virus</i>
HKSA	: Hubungan Kuantitatif Struktur & Aktivitas
IUPAC	: <i>International Union of Pure and Applied Chemistry</i>
JA	: Justidrusamides A
JB	: Justidrusamides B
JC	: Justidrusamides C

JD	: Justidrusamides D
M o	: <i>Mouse/ Oral</i>
MR	: <i>Molar Refractivity</i>
MRDD	: <i>Maximum Recommended Daily Dose</i>
OECD	: <i>Organisation for Economic Development</i>
PCR	: <i>Polymerase Chain Reaction</i>
QSAR	: <i>Quantitative Structure-Activity Relationship</i>
R o	: <i>Rat/ Oral</i>
RI	: <i>Reliability</i>
SAs	: <i>Structural Alerts</i>
TEST	: <i>Toxicity Evaluation Software Tool</i>