

## DAFTAR PUSTAKA

- Abdullah, S. S., utra, P. P., Antasionasti, I., Rundengan, G., Suoth, E. J., Abdullah, R. P. I., & Abdullah, F. 2021. Analisis Sifat Fisikokimia, Farmakokinetika dan Toksikologi pada Pericarpium Pala (*Myristica fragrans*) secara Artificial Intelligence. *Chem. Prog.* 14(2) : 81-92.
- Aktalina, L. 2022. Polimorfisme Gen Enzyme Epoxide Hydrolase da Risiko Terjadinya Kanker Paru. *Majalah Ilmiah Methoda.* 12(3) : 177-184.
- Alagga A. A., & Gupta V. Drug Absorption [diunduh 5 oktober 2023]. Tersedia dari: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK557405/>
- Alrubaie, L. A., Muhasin, R. J., & Mousa, M. N. 2020. Synthesis, characterization and evaluation of anti-inflammatory properties of novel  $\alpha,\beta$ -unsaturated ketones. *Tropical Journal of Pharmaceutical Research.* 19(1) : 147-154.
- Awortwe C, Fasinu PS & Rosenkranz B. 2014. Application of Caco-2 cell line in herb-drug interaction studies: current approaches and challenges. *J Pharm Pharm Sci.* 17(1):1-19.
- Baan R. A., Stewart, B.W., & Straif, K. 2019. *Tumour Site Corcordance and Mechanisms of Carcinogenesis.* Lyon : International Agency for Researcher on Cancer.
- Bhat, V., & Chatterjee, J. 2021. The Use of In Silico Tools for the Toxicity Prediction of Potential Inhibitors of SAS-CoV-2. *Alternative to Laboratory Animals.* 49(1-2) : 22-32.
- Bohnert T & Gan LS. Plasma protein binding: from discovery to development. *J Pharm Sci.* 102(9) : 2953-2994.
- Chakole, R. D. & Charde, M. S. 2022. Molecular Docking, Pre-ADME, and Pre-Tox Analysis of Swainsonine and Castanospermine as Potential Glucokinase Activators. *Journal of Pharmaceutical Negative Results.*13(10): 6456-6464
- Cheng, F., Yu, Y., Shen, J., Yang, L., Li, W., Liu, G., Lee, P.W., & Tang, Y. 2011. Classification of cytochrome P450 inhibitors and noninhibitors using combined classifiers. *J. Chem. Inf. Model.* 51(5) : 996–1011.
- Daina, A., Michielin, O., & Zoete, V. A. 2017. SwissADME: A free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. *Sci. Rep.* 7(1) : 1– 13.
- Daneman, R., & Prat, A. 2015. The Blood-Brain Barrier. *Cold Spring Harb Perfect Biol.* 7(1) : 1-23.
- DiMasi, J. A., Grabowski, H. G., & Hansen, R. W. 2016. Innovation in the pharmaceutical industry: New estimates of R&D costs. *Journal of health economics.* 47 : 20-33.
- Dulsat, J., Nieto-Lopez, B., Tejedor-Estrada, R., & Borrell, I. J. 2023. Evaluation of Free Online ADMET Tools for Academic or Small Biotech Environments. *Molecules.* 28(776) : 1-17.
- El-Husseiny, W. M., A.El-Sayed, M.A., Abdel-aziz, N. I., El-Azab, A. S., Ahmed, E. R., & M. Abdel Aziz, A. A. 2018. Synthesis, antitumour and antioxidant activities of novel  $\alpha,\beta$ -unsaturated ketones and related heterocyclic analogues

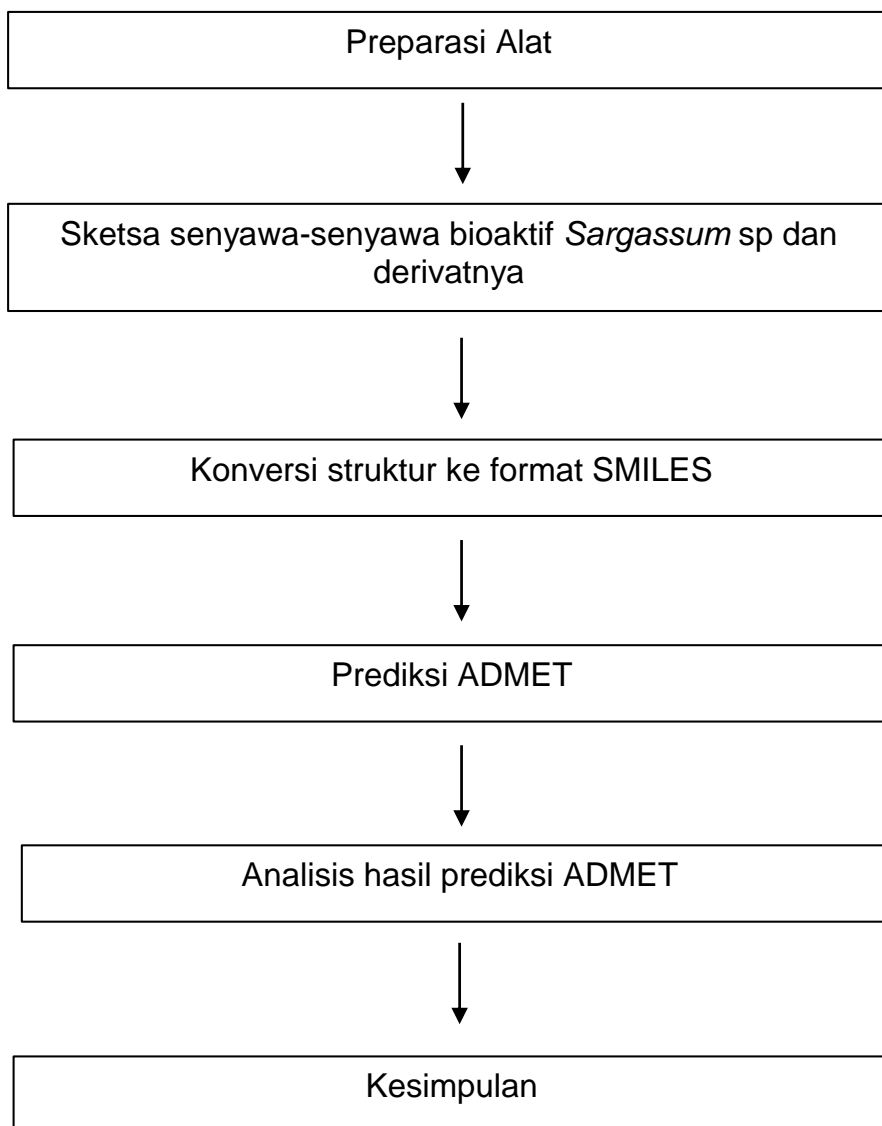
- : EGFR inhibition and molecular modelling study. *Journal of ANzyme Inhibition and Medical Chemistry*. 33(1) : 507-518.
- Fadlan, A., Warsito, T., & Sarmoko. 2022. Evaluasi Parameter Fisikokimia, Farmakokinetika, dan Farmakodinamika Senyawa Fisetin dalam Desain Obat. *Akta Kimia Indonesia*. 7(1) : 1-13.
- Fajri, M. I., Samidjan, I., & Rachmawati, D. 2020. Pengaruh Jarak Tanam Rumpul Laut (*Sargassum* sp.) yang Berbeda Terhadap Pertumbuhan. *Jurnal Sains Akuakultur Tropis*. 4(2) : 156-160.
- Feinberg, E. N., Joshi, E., Pande, V. S., & Cheng, A. C. 2020. Improvemet in ADMET Prediction with Multitask Deep Featurization. *Journal of Medical Chemistry*. 63(16) : 8835-8848.
- Fujita, T., Urban, T. J., Leabman, M. K., Fujita, K., & Giacomini, K. M. 2006. Transport of drugs in the kidney by the human organic cation transporter, OCT2 and its genetic variants. *Journal of Pharmaceutical Sciences*. 95(1): 25-36.
- Eder, E., Scheckenbach, S., Deininger, C., & Hoffman, C. 1993. The Possible role of  $\alpha,\beta$ -unsaturated carbonyl Compounds in Mutagenesis and Carcinogenesis. *Toxicology Letters*. 67: 87-103.
- Egan, W. J., Merz., K. M., & Baldwin, J. J. 2000. Prediction of Drug Absorption Using Multivariate Statistics. *Journal of Medicinal Chemistry*. 43(21) : 3867–3877
- Ghafourian, T. & Amin, Z. 2013. QSAR Models for the Prediction of Plasma Protein Binding. *Bioimpacts*. 3(1) : 21–27
- Ghose, A. K., Viswanadhan, V. N., & Wendoloski, J. J. 1999. A Knowledge-Based Approach in Designing Combinatorial or Medicinal Chemistry Libraries for Drug Discovery. 1, A Qualitative and Quantitative Characterization of Known Drug Databases. *Journal of Combinatorial Chemistry*. 1(1) : 55–68
- Gomes, A. R., Varela, C.L., Tavares-da-Silva, E. J., & Roleira, F. M. F. 2020. Epoxide containing molecules : A good or a bad drug design approach. *European Journal of Medicinal Chemistry*. 201 : 1-64.
- Grabowski, T. & Jaroszewski, J. J. 2009. Bioavailability of Veterinary Drugs In vivo and In silico. *Journal of Veterinary Pharmacology and Therapeutics*. 32(3): 249-257.
- Guan, L., Yang, H., Cai, Y., Sun, L., Di, P., Li, W., Liu, G., & Tang, Y. 2018. ADMET-score - a comprehensive scoring function for evaluation of chemical drug-likeness. *Medchemcomm*. 10(1):148-157.
- Gunathilaka, T. L., Samarakoon, K., Ranasinghe, P., & Peiris, L. D. C. 2020. Antidiabetic potential of marine brown algae—a mini review. *Journal of diabetes research*.
- Gunathilaka, T, Rangee K. L., & Peiris D. 2022. *Advanced Pharmacological Uses of Marine Algae as an Anti-Diabetic Therapy*. Natural Medicinal Plants. IntechOpen. Available at: <http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.96807>.
- Hall, L.M., Hall, L.H., & Kier, L.B. 2003. QSAR modeling of beta-lactam binding to human serum proteins. *J. Comput. Aided Mol. Des*.17(2-4) : 103–118

- Hernandez, L. G., Steeg, H. V., Lujiten, M., & Benthem, J. V. 2009, Mechanisms of non-genotoxic Carcinogens and Importance of a Weight of Evidence Approach. *Mutation Research/Reviews in Mutation Research*. 682(2- 3): 94-109.
- Hidayati, H. B. & Kustriyani, A. 2020. Paracetamol, Migraine, and Medication Overuse Headache (MOH). *Journal of Pain : Headache and Vertigo*. 1(2) : 42-47.
- Hughes, J. D., Blagg, J., Price, D. A., Bailey, S., Decrescenzo, G. A., Devraj, R. V., & Attwood, R. M. (2008). Physiochemical drug properties associated with in vivo toxicological outcomes. *Bioorganic & medicinal chemistry letters*, 18(17), 4872-4875.doi: 10.1016/j.bmcl.2008.07.071.
- Kementerian Kesehatan RI. 2018. Hasil Riset Kesehatan Dasar (Riskesdas) 2018. Jakarta: Badan Penelitian dan Pengembangan Kesehatan Kementerian RI.
- Kholifah E. & Endah. 2022. Analisis Profil Fisika Kimia dan Farmakokinetik Senyawa Pentagamavunon-1 Secara Komputasi. *Duta Pharma Journal*. 2(1) : 1-7.
- Krihariyani, D., Sasongkowati, R., & Haryanto, E. 2020. Studi In Silico Sifat Farmakokinetik, Toksisitas, dan Aktivitas Imunomodulator Brazilein Kayu Secang Terhadap Enzim 3-Chymotrypsin-Like Cyctein Protease Coronavirus. *Journal of Indonesian Medical Laboratory and Science*. 1(1) : 76-90.
- Lee, S. H., & Jeon, Y. J. 2013. Anti-diabetic effects of brown algae derived phlorotannins, marine polyphenols through diverse mechanisms. *Fitoterapia*. 86 : 129-136.
- Li, H., Yap, C.W., Ung, C.Y., Xue, Y., Cao, Z.W., & Chen, Y.Z. 2005. Effect of selection of molecular descriptors on the prediction of blood-brain barrier penetrating and nonpenetrating agents by statistical learning methods. *J. Chem. Inf. Model*. 45(5) : 1376–1384
- Lipinski, C. A. 2000. Drug-like Properties and the Causes of Poor Solubility and Poor Permeability. *Pharmacol. Toxicol. Methods*. 44 : 235-249.
- Lipinski, C. A., Lombardo, F., Dominy, B. W., & Feeney, P. J. 1997. Experimental and computational approaches to estimate solubility and permeability in drug discovery and development settings. *Advanced Drug Delivery Reviews* : 23(1-3) : 3–25
- Maeda, H. (2013). Anti-obesity and anti-diabetic activities of algae. In *Functional ingredients from algae for foods and nutraceuticals* (pp. 453-472)
- March-Vila, E., Pinzi, L., Sturm, N., Tinivella, A., Engkvist, Chen, H., & Rastelli, G. 2017. On the integration of in silico drug design methods for drug repurposing. *Font. Pharmacol*. 8 : 1-7.
- Maulida, R. & Puspitasari, I. M. 2021. Review Artikel : Kajian Interaksi Obat pada Pasien Geriatri dengan Peresepan Polifarmasi. *Farmaka*. 19(1) : 95-103.
- Motohashi, H. & Inui, K. 2013. Organic Cation Transporter OCTs (SLC22) and MATEs (SLC47) in the Human Kidney. *The AAPS Journal*. 15(2) : 581-588.
- Muegge, I., Heald, S. L., & Brittelli, D. 2001. Simple Selection Criteria for Drug-like Chemical Matter. *Journal of Medicinal Chemistry*. 44(12) : 1841–1846

- Nicolov, M., Cocora, M., Buda, V., Danciu, C., Duse A. O., Watz, C., & Borcan F. 2021. Hydrosoluble and Liposoluble Vitamins: New Perspectives through ADMET Analysis. *Medicina*. 57(11):1204.
- Nursanti, O., Aziz, A., & Hadisoebroto, G. 2013. Prediksi Toksisitas dan Farmakokinetika untuk Mendapatkan Kandidat Obat Analgesik. *Journal of noncommunicable Diseases*. 3(1) : 34-46.
- Nusantoro, Y. R., & Fadlan, A. 2020. Analisis Sifat Mirip Obat, Prediksi DMET, dan Penambatan Molekular Isatinil-2-Aminobenzoilhidrazon dan kompleks logam transisi Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II) Terhadap BCL2-XL. *Akta Kimia Indonesia*. 5(2) : 114-126.
- Obach, R.S., Lombardo, F., & Waters, N.J. 2008. Trend analysis of a database of intravenous pharmacokinetic parameters in humans for 670 drug compounds. *Drug Metab. Dispos.* 36(7) : 1385–1405
- Pawestri, S., Wiayanti, R., & Kurnianto, D. 2021. Kajian Pustaka : Potensi Knadungan Polifenol pada *Sargassum* sp. Sebagai Alternatif Penanganan Diabetes Mellitus Tipe 2. *Jurnal Ilmu Pangan dan Hasil Pertanian*. 5(2) : 118—139.
- Phillips, D. H. & Arlt, V. M. 2009. Genotoxicity : damage to DNA and its consequences. *Molecular, Clinical and Environmental Toxicology*. 1 : 87-110.
- Pires, D. E. V., Tom L. B., & David B. A. 2015, “PkCSM : Predicting SmallMolecule Pharmacokinetic Properties Using Graph-Based Signatures (Theory- How to Enterpret PkCSM Result).” pKCSM: <http://biosig.unimelb.edu.au/pkcsml/theory>
- Praceka, M. S., Yunita, E. N., Semesta, C. D., Putri, R. N., Mikdar, N. N., Sitinjak, E. N., Styawati, L. U., & Muchtaridi. 2022. Molecular Docking and Toxicity from Temulawak Rhizome (*Curcuma canthorrhiza* Roxb.) against COX-2. *IJPST*. 1(1) : 106-115.
- Pradana, D. A., Hayati, F., Sukma, D. 2013. Pengaruh Pra-Perlakuan Madu Terhadap Farmakokinetika Eliminasi Rifampisin pada Tikus Wistar Jantan. *Jurnal Ilmiah Farmasi*. 10(1) : 18-27.
- Putra, P. P., Fauzana, A., & Lucida, H. 2020. *In Silico* Analysis of Physical-Chemical Properties, Target Potential, and Toxicology of Pure Compound from Natural products. *Indonesian Journal of Pharmaceutical Science and Technology*. 7(3) : 107-117.
- Ranjith, D. & Ravikumar, C. 2019. SwissADME prediction of pharmacokinetics and drug-likeness properties of small molecules present in *Ipomoea mauritiana* Jacq. *Journal of Pharmacognosy and Phytochemistry*. 8(5): 2063-2073.
- Riyaldi, M. R., Fatiya, N. U., Dipadharma, R. H. F., Kusnandi, I. F., Hidayat, S., Suhandi, C., & Muchtaridi. 2022. Studi In-Silico Senyawa pada Ekstrak Bawang Putih (*Allium sativum* L.) sebagai Inhibitor Neruramidase pada Influenza. 20(3) : 1-11.
- Rostkowski, M., Spjuth, O., & Rydberg, P. 2013. WhichCyp: Prediction of cytochromes P450 inhibition. *Bioinformatics*. 29(16) : 2051–2052.
- Ruiz-Garcia, A., Bermejo, M., Moss, A., & Casabo, V. G. 2008. Pharmacokinetics in

- Drug Discovery. *Journal Of Pharmaceutical Science*. 97(2) : 654-690.
- Rushdi, M. I., Abdel-Rahman, I. A., Saber, H., Attia, E. Z., Abdelraheem, W. M., Madkour, H. A., Hassan, H. M., Almaidomy, A. H., & Abdelmohsen, U. R. 2020. Pharmacological and natural products diversity of the brown algae genus *Sargassum*. *Royal Society Of Chemistry*. 10 : 24951-24972.
- Ruswanto, nofianti, T., Mardianingrum, R., Lestari, T., & Sepriliani, A. 2018. Design and In Silico Study of Kuwanon-H as Anti-HIV Drug Candidate. *Jurnal Kimia VALENSI : Jurnal Penelitian dan Pengembangan Ilmu Kimia*. 4(1) : 57-66.
- Sagitasa, S., Elizabeth K., Sulaeman, L. I., Rafasafly, A., Syafira, D. W., Kristande, A., & Muchtaridi, M. 2021. Studi *In Silico* Senyawa Aktif Daun Singawalang (*Petiveria, alliacea*) Sebagai Penurun Kadar Glukosa Darah Untuk Pengobatan Penyakit Diabetes Melitus Tipe-2. *Chimica ey Natura Acta*. 9(2) : 58-66.
- Shamsudin N. F., Ahmed Q.U., Mahmood S., Shah S. A. A., Sarian M. N., Khattak M. M. A. K., Khatib, A., Sabere, A. S. M., Yusoff, Y. M., & Latip, J. 2022. Flavonoids as Antidiabetic and Anti-Inflammatory Agents: A Review on Structural Activity Relationship-Based Studies and Meta-Analysis. *Int J Mol Sci*. 23(20) :12605.
- Shen, J., Cheng, F., Xu, Y., Li, W., & Tang, Y. 2010. Estimation of ADME properties with substructure pattern recognition. *J. Chem. Inf. Model*. 50(6) : 1034–1041.
- Taniguchi, R., Ito, C., Keitoku, S., Miyake, Y., Itoigawa, M., Matsui, T., & Shibata, T. (2022). Analysis on the Structure of Phlorethols Isolated From the Warm-Temperate Brown Seaweed *Sargassum carpophyllum* and Their Antioxidant Properties. *Natural Product Communications*, 17(6).
- Thomas, N. V., & Kim, S. K. 2011. Potential pharmacological applications of polyphenolic derivatives from marine brown algae. *Environmental toxicology and pharmacology*, 32(3) : 325-335
- Veber, D. F., Johnson, S. R., Cheng, H.-Y., Smith, B. R., Ward, K. W., & Kopple, K. D. 2002. Molecular Properties That Influence the Oral Bioavailability of Drug Candidates. *Journal of Medicinal Chemistry*. 45(12) : 2615–2623
- Wang, N.-N., Huang, C., Dong, J., Yao, Z.-J., Zhu, M.-F., Deng, Z.-K., Lv, B., Lu, A.-P., Chen, A.F., Cao, D.-S. 2017. Predicting human intestinal absorption with modified random forest approach: A comprehensive evaluation of molecular representation, unbalanced data, and applicability domain issues. *RSC Adv*, 7 : 19007–19018.
- Watanabe, R., Esaki, T., Kawashima, H., Kitatani, Y. N., Nagao, C., Ohashi, R., & Mizuguchi, K. 2018. Predicting Fraction Unbound in Human Plasma from Chemical Structure : Improve Accuracy in the Low Value Ranges. *Molecular pharmaceutics*. 15(11) : 5302-5311.
- Wenlock, M. C., Potter, T., Bartin, P., & Austin, R. P. 2011. A method for measuring the lipophilicity of compounds in mixture of 10. *J. Biomol. Screen*. 16 : 348-355
- Wibisono, N. & Martino, Y. A. 2023. Uji AKtivitas Antidiabetes Kulit Batang Pulau (*Alstonia scholaris*) melalui Studi In Silico dan Prediksi Profil

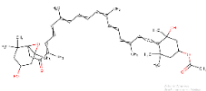
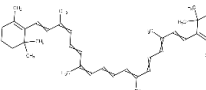
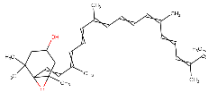
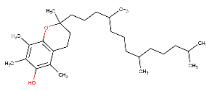
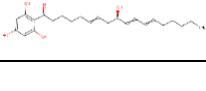
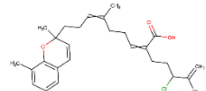
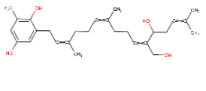
- Farmakokinetika. *Biosaintropis (Bioscience-Tropic)*. 8(2) : 59-64.
- Wilson, T., Singh, A. P., Vorsa, N., Goettl, C. D., Kittleson, K. M., Roe, C. M., Kastello, G. M., & Ragsdale, F. R. 2008. Human glycemic response and phenolic content of unsweetened cranberry juice. *Journal of Medicinal Food*. 11: 46–54.
- Wu, D., Chen, Q., Chen, X., Han, F., Chen, Z., & Wang, Y. 2023. The blood-brain barrier : structure, regulation, and drug delivery. *Signal Transduction and Targeted Therapy*. 8(217) : 1-27.
- Wulandari, R. P., Gabriel, K., Nurdin, H. A., Pakhrul, D. H. F., Harits, S. S., Prameswari, N., Pribadi, A. P. A., & Aulifa, D. L. 2023. *In Silico* Study of Secondary Metabolite Compound in Parsley (*Petroselinum crispum*) as a Drug Therapy for Blood Cancer (Myeloproliferative Neoplasm (MPN)) targeting JAK-2. *Indonesian Journal of Chemical Science*. 12(2) : 216-228.
- Xiong, G., Wu, Z., Yi, J., Fu, L., Yang, Z., Hsieh, C., ... Cao, D. 2021. ADMETlab 2.0: an integrated online platform for accurate and comprehensive predictions of ADMET properties. *Nucleic Acids Research*. 49(W1) : W5–W14.
- Yan, A., Liang, H., Chong, Y., Nie, X., & Yu, C. 2013. In-silico prediction of blood-brain barrier permeability. *SAR QSAR Environ. Res*. 24(1) : 61–74.
- Yang, H., Sun, L., Li, W., Liu, G., & Tang, Y. 2018. In Silico Prediction of Chemical Toxicity for Drug Design Using Machine Learning Methods and Structural Alerts. *Frontiers in Chemistry*. 6:1–12.
- Yap, C.W., Li, Z.R., & Chen, Y.Z. 2006. Quantitative structure-pharmacokinetic relationships for drug clearance by using statistical learning methods. *J. Mol. Graph. Model*. 24(5) : 383–395.
- Yasin, A. S., Azzahra, A., Ramadhani, N. E., & Mylanda Vega. 2020. Studi Penambatan Molekuler dan Prediksi ADMET Senyawa Bioaktif Beberapa Jamu Indonesia Terhadap SAS-COV-2 Main Protease (M<sup>pro</sup>). *BIMFI*. 7(2) : 24-41.
- Yuslianti, E. R., Bachtiar, M. B., Suniarti, D. F., & Sutjiatmo, A. B. Standarisasi Farmasitikal Bahan Alam Menuju Fitofarmaka untuk Pengembangan Obat Tradisional Indonesia. *dentika Dental Journal*, 19(2) : 179-185.
- Zazuli, Z., Duin, N. J. C., Jansen, K., Vijverberg, S. J. H., Maitland-van der Zee, A. H., & Masereeuw, R. 2020. The Impact of Genetic Polymorphisms in Organic Cation Transporters on Renal Drug Disposition. *Internation Journal of Molecular Science*. 21(18) : 1-23.
- Zhivkova, Z. & Doytchinova, I. 2012. Quantitative structure—Plasma protein binding relationships of acidic drugs. *J. Pharm. Sci*. 101(12) : 4627–4641.
- Zhao, M., Ma, J., Li, M., Zhang, Y., Jiang, B., Zhao, X., Huai, C., Shen, L., Zhang, N., He, L., & Qin, S. 2021. Cytochrome P450 Enzymes and Drug Metabolism in Humans. *Int J Mol Sci*. 22(23): 12808
- Zhu, X.W., Sedykh, A., Zhu, H., Liu, S.S., & Tropsha, A. 2013. The use of pseudo-equilibrium constant affords improved QSAR models of human plasma protein binding. *Pharm. Res*. 30(7) : 1790–1798.

**LAMPIRAN****Lampiran 1. Skema Kerja****Lampiran 1.**

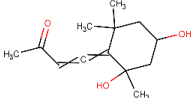
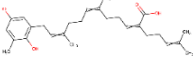
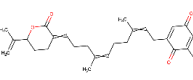
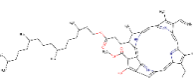
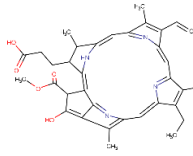
## Lampiran 2. Hasil penelitian

## a) Golongan Terpenoid

Tabel 37. Data Senyawa Uji Golongan Terpenoid

No	Identitas Senyawa	Golongan	Struktur	SMILES
1	<i>Fucoxanthin</i>	Terpenoid		<chem>CC(=CC=CC=C(C)C=CC=C(C)C(=O)CC12C(CC(CC1(O2)C)O)(C)C)C=CC=C(C)C=C=C3C(CC(CC3(C)O)OC(=O)C)(C)C</chem>
2	<i>Beta-Caroten</i>	Terpenoid		<chem>CC1=C(C(CCC1)(C)C)C=CC(=CC=CC(=CC=CC=C(C)C=CC=C(C)C)C=CC2=C(CCCC2(C)C)C)C</chem>
3	<i>Violaxanthin</i>	Terpenoid		<chem>CC(=CC=CC=C(C)C=CC=C(C)C=CC12C(CC(CC1(O2)C)O)(C)C)C=CC=C(C)C=CC34C(CC(CC3(O4)C)O)(C)C</chem>
4	<i>Alfa-tocopherol</i>	Terpenoid		<chem>CC1=C(C2=C(CCC(O2)(C)CCCC(C)C)C)C=CC(C)C=CC(C)C)C(=C1O)C)C</chem>
5	<i>Retroflexanone</i>	Terpenoid		<chem>C1(=CC(=CC(=C1C(CCCCC=CC[C@H](C=CC=CCCCC)O)=O)O)O)O</chem>
6	<i>Fallachromenoic acid</i>	Terpenoid		<chem>C1=C(C=C(C2=C1C=CC(O2)C)C)C=CC(=O)O)C)C)C(CCC=C(CCC(C)C)C)C(=O)O)C)C)O</chem>
7	<i>Fallahydriquinone</i>	Terpenoid		<chem>CC(=CCC(O)C(=C)CCC(=CCCC(=CCc1cc(O)cc(C)c1O)C)C)CO)C</chem>



8	<i>Grasshopper Ketone</i>	Terpenoid		<chem>CC(=O)C=C=C1C(CC(CC1(C)O)O)C</chem>
9	<i>Sargahydroquinoic acid</i>	Terpenoid		<chem>CC1=CC(=CC(=C1O)CC=C(C)CCC=C(C)CCC=C(CCC=C(C)C)C(=O)O)O</chem>
10	Senyawa 16	Terpenoid		<chem>C1(C(=CC(C=C1C)=O)CC=C(CCC=C(CCC=C2C(=O)OC(CC2)C(=C)C)C)C)=O</chem>
11	Senyawa 21	Terpenoid		<chem>CCC1=C(C2=NC1=CC3=C(C4=C(C(C(=C5C(C(C(=CC6=NC(=C2)C(=C6)C=C)N5)C)CCC(=O)OCC=C(C)CCCC(C)CCCC(C)C)C4=N3)C(=O)OC)O)C</chem>
12	Senyawa 23	Terpenoid		<chem>CCC1=C(C2=NC1=CC3=C(C4=C(C(C(=C5C(C(C(=CC6=NC(=C2)C(=C6)C=C)N5)C)CCC(=O)O)C4=N3)C(=O)OC)O)C</chem>

**Tabel 38.** Lampiran data prediktif *Drug-Likeness* senyawa uji golongan Terpenoid (SwissADME)

No	Senyawa	Lipinski	Ghose	Veber	Egan	Muegge
1	<i>Fucoxanthin</i>	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
2	<i>Beta-Caroten</i>	Tidak	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
3	<i>Violaxanthin</i>	Tidak	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
4	<i>Alfa-tocopherol</i>	Iya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
5	<i>Retroflexanone</i>	Iya	Iya	Tidak	Iya	Tidak
6	<i>Fallachromenoic acid</i>	Iya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
7	<i>Fallahydriquinone</i>	Iya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
8	<i>Grasshopper Ketone</i>	Iya	Iya	Iya	Iya	Iya
9	<i>Sargahydroquinoic acid</i>	Iya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
10	Senyawa 16	Iya	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
11	Senyawa 21	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak

12	Senyawa 23	Iya	Tidak	Iya	Tidak	Iya
----	------------	-----	-------	-----	-------	-----

**Tabel 39.** Lampiran data prediktif *Drug-Likeness* senyawa uji golongan Terpenoid (ADMETLab 2.0)

No	Senyawa	NP Score	Lipinski Rules	Pfizer Rules	GSK Rules	Golden Rules
1	<i>Fucoxanthin</i>	2.335	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
2	<i>Beta-Caroten</i>	1.127	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
3	<i>Violaxanthin</i>	1.534	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
4	<i>Alfa-tocopherol</i>	1.500	Iya	Tidak	Tidak	Tidak
5	<i>Retroflexanone</i>	1.789	Iya	Iya	Tidak	Iya
6	<i>Fallachromenoic acid</i>	2.804	Iya	Tidak	Tidak	Iya
7	<i>Fallahydriquinone</i>	2.145	Iya	Iya	Tidak	Iya
8	<i>Grasshopper Ketone</i>	2.541	Iya	Iya	Iya	Iya
9	<i>Sargahydroquinoic acid</i>	1.914	Iya	Iya	Tidak	Iya
10	Senyawa 16	2.45	Iya	Tidak	Tidak	Iya
11	Senyawa 21	0.875	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
12	Senyawa 23	0.691	Iya	Iya	Tidak	Tidak

**Tabel 40.** Lampiran data prediktif kemampuan ADME senyawa uji golongan Terpenoid (Server tools pkCSM)

No	Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme		Ekskresi	
		Caco-2	HIA	Fu	Vd	BBB	2D6	3A4	Klirens	OCT-2
1	<i>Fucoxanthin</i>	0.74	90.54	0	-0.66	-0.53	Tidak	Iya	0.34	Tidak
2	<i>Beta-Caroten</i>	1.26	91.73	0	0.27	0.94	Tidak	Iya	1.06	Tidak
3	<i>Viola xanthin</i>	0.66	91.09	0	-0.27	-0.13	Tidak	Iya	0.51	Tidak
4	<i>Alfa-tocopherol</i>	1.35	89.78	0	0.71	0.88	Tidak	Iya	0.79	Tidak
5	<i>Retroflexanone</i>	0.10	75.16	0.14	0.17	-1.10	Tidak	Iya	1.46	Tidak
6	<i>Falla chromenoic acid</i>	0.33	91.87	0	-0.91	-0.39	Tidak	Iya	-0.15	Tidak
7	<i>Fallahydriquinone</i>	0.80	88.05	0.16	-0.09	-1.089	Tidak	Tidak	1.40	Tidak
8	<i>Grasshopper Ketone</i>	1.23	94.90	0.55	-0.28	-0.056	Tidak	Tidak	1.27	Tidak
9	<i>Sargahydroquinoic acid</i>	0.57	91.65	0.01	-1.05	-0.96	Tidak	Iya	1.27	Tidak
10	Senyawa	1.18	95.	0	0.03	-0.31	Tidak	Iya	1.63	Tidak

	16		89							
11	Senyawa 21	0.58	100	0	-1.00	-1.07	Tidak	Iya	-0.1	Tidak
12	Senyawa 23	0.54	70.99	0.02	-0.68	-0.88	Tidak	Iya	0.14	Tidak

**Tabel 41.** Lampiran data prediktif kemampuan ADME senyawa uji golongan Terpenoid (Server tools ADMETLAB 2.0)

No	Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme			Ekskresi
		Caco-2	HIA	Fu	Vd	BBB	2C9	2D6	3A4	Klirens
1	<i>Fuco xanthin</i>	-4.81	0.09	2.9 1	3.6 8	0.48	Tidak	Iya	Iya	1.77
2	<i>Beta-Caroten</i>	-6.00	0.18	2.1 3	7.3 3	0.0	Iya	Iya	Iya	0.23
3	<i>Viola xanthin</i>	-5.14	0.68	2.9 4	2.8	0.17 4	Tidak	Iya	Iya	5.06
4	<i>Alfa-tocopherol</i>	-4.78	0.00 3	2.0 0	6.8 37	0.81 3	Iya	Tidak	Tidak	8.30
5	<i>Retro flexanone</i>	-4.98	0.15	2.0 2	1.1 9	0.02 7	Iya	Tidak	Tidak	7.16
6	<i>Fallachrom enoic acid</i>	-4.80	0.00 4	0.5 7	2.2 1	0.08 8	Iya	Tidak	Tidak	3.55
7	<i>Fallahydriq uinone</i>	-4.90	0.01	4.5 6	6.9 6	0.12 4	Iya	Tidak	Tidak	14.90
8	<i>Grass hopper Ketone</i>	-4.60	0.01	40. 4	1.4 5	0.96	Tidak	Tidak	Tidak	5.69
9	<i>Sargahydro quinoic acid</i>	-4.94	0.01	4.0 5	3.2 5	0.08	Iya	Tidak	Tidak	8.56
10	Senyawa 16	-4.62	0.01	2.0 52	3.9 6	0.00 2	Iya	Tidak	Tidak	5.31
11	Senyawa 21	-5.33	0.09	1.0 5	5.3 1	0.00 1	Tidak	Tidak	Iya	0.45
12	Senyawa 23	-5.69	0.01	3.5	1.3 2	0.0	Tidak	Tidak	Iya	0.65

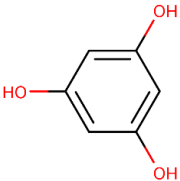
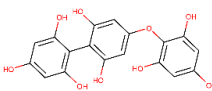
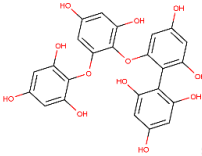
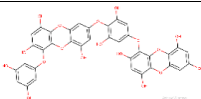
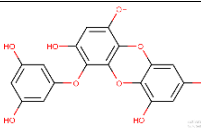
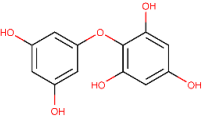
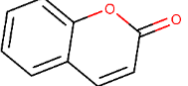
**Tabel 42.** Lampiran data prediktif toksisitas senyawa uji golongan Terpenoid

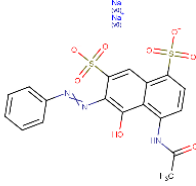
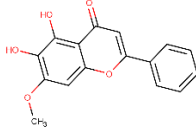
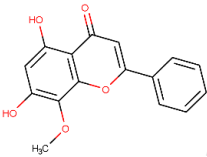
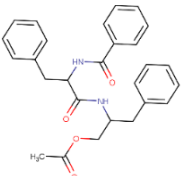
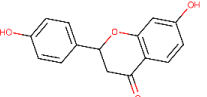
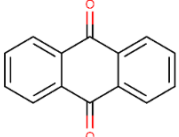
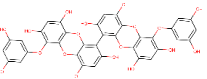
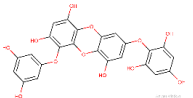
No	Senyawa	Genotoksik	non-Genotoksik	Ames-test
1	<i>Fuco xanthin</i>	Iya	Iya	Tidak
2	<i>Beta-Caroten</i>	Tidak	Tidak	Iya
3	<i>Violaxanthin</i>	Iya	Iya	Tidak
4	<i>Alfa-tocopherol</i>	Tidak	Tidak	Tidak
5	<i>Retroflexanone</i>	Tidak	Tidak	Tidak
6	<i>Fallachromenoic acid</i>	Iya	Iya	Tidak
7	<i>Fallahydriquinone</i>	Iya	Tidak	Tidak
8	<i>Grasshopper Ketone</i>	Tidak	Tidak	Tidak

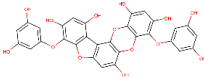
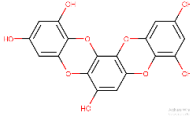
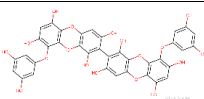
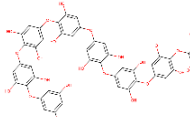
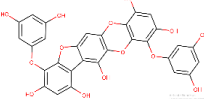
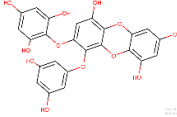
9	<i>Sargahydroquinoic acid</i>	Tidak	Tidak	Tidak
10	Senyawa 16	Iya	Iya	Tidak
11	Senyawa 21	Iya	Tidak	Tidak
12	Senyawa 23	Tidak	Tidak	Tidak

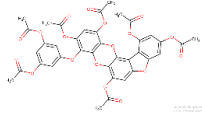
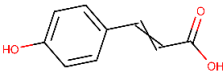
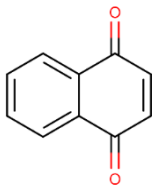
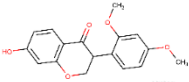
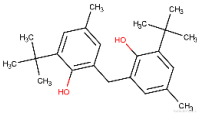
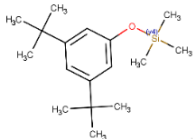
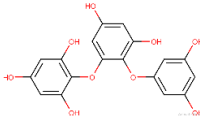
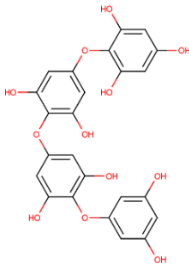
## b) Fenolik

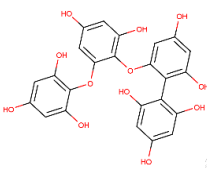
**Tabel 43.** Data Senyawa Uji Golongan Fenolik

No	Identitas Senyawa	Golongan	Struktur	SMILES
1	<i>Phloroglucinol</i>	Fenolik		<chem>C1=C(C=C(C=C1O)O)O</chem>
2	<i>Fucophlorethol</i>	Fenolik		<chem>C1=C(C=C(C(=C1O)C2=C(C=C(C=C2O)OC3=C(C=C(C=C3O)O)O)O)O)O</chem>
3	<i>Fucodiphlorethol</i>	Fenolik		<chem>C1=C(C=C(C(=C1O)C2=C(C=C(C=C2OC3=C(C=C(C=C3OC4=C(C=C(C=C4O)O)O)O)O)O)O)O)O</chem>
4	<i>Dieckol</i>	Fenolik		<chem>C1=C(C=C(C=C1O)OC2=C(C=C(C3=C2OC4=C(C=C(C=C4OC5=C(C=C(C=C5OC6=C(C=C(C=C6OC7=C6OC8=C(C=C(C=C8O7)O)O)O)O)O)O)O)O)O</chem>
5	<i>Eckol</i>	Fenolik		<chem>C1=C(C=C(C=C1O)OC2=C(C=C(C3=C2OC4=C(C=C(C=C4O3)O)O)O)O)O</chem>
6	<i>Diphlorethol</i>	Fenolik		<chem>C1=C(C=C(C=C1O)OC2=C(C=C(C=C2O)O)O)O</chem>
7	<i>Coumarin</i>	Fenolik		<chem>C1=CC=C2C(=C1)C=CC(=O)O2</chem>

8	<i>Lignin</i>	Fenolik		<chem>CC(=O)NC1=C2C(=C(C=C1)S(=O)(=O)[O-])C=C(C(=C2O)N=NC3=CC=CC=C3)S(=O)(=O)[O-].[Na+].[Na+]</chem>
9	<i>Negletin</i>	Fenolik		<chem>COC1=C(C(=C2C(=C1)OC(=CC2=O)C3=CC=CC=C3)O)O</chem>
10	<i>Wogonin</i>	Fenolik		<chem>COC1=C(C=C(C2=C1OC(=CC2=O)C3=CC=CC=C3)O)O</chem>
11	<i>Aurantiamide Acetate</i>	Fenolik		<chem>CC(=O)OCC(CC1=CC=CC=C1)NC(=O)C(CC2=CC=CC=C2)NC(=O)C3=CC=CC=C3</chem>
12	<i>Liquiritigenin</i>	Fenolik		<chem>C1C(OC2=C(C1=O)C=CC(=C2)O)C3=CC=C(C=C3)O</chem>
13	<i>Anthraquinone</i>	Fenolik		<chem>C1=CC=C2C(=C1)C(=O)C3=CC=CC=C3C2=O</chem>
14	Senyawa 1	Fenolik		<chem>C1=C(C=C(C=C1O)OC2=C(C=C(C3=C2OC4=C(C=C(C(=C4O3)C5=C6C(=C(C=C5O)O)OC7=C(O6)C(=CC(=C7O)C8=CC(=CC(=C8)O)O)O)O)O)O)O)O</chem>
15	Senyawa 2	Fenolik		<chem>C1=C(C=C(C=C1O)OC2=C(C=C(C3=C2OC4=C(C=C(C(=C4O3)OC5=C(C=C(C=C5O)O)O)O)O)O)O)O</chem>

16	Senyawa 3	Fenolik		<chem>C1=C(C=C(C=C1O)OC2=C(C=C(C3=C2OC4=C3C5=C(C(=C4)O)OC6=C(O5)C(=CC(=C6OC7=CC(=CC(=C7)O)O)O)O)O)O)O</chem>
17	Senyawa 4	Fenolik		<chem>C1(=C5C(=CC(=C1)O)OC2=C(C=C(C4=C2OC3=C(C=C(C(=C3O4)O)O)O)O)O5)O</chem>
18	Senyawa 5	Fenolik		<chem>C1=C(C=C(C=C1O)OC2=C(C=C(C3=C2OC4=C(O3)C=C(C(=C4O)C5=C(C6=C(C=C5O)OC7=C(O6)C(=C(C=C7O)O)OC8=CC(=CC(=C8)O)O)O)O)O)O</chem>
19	Senyawa 6	Fenolik		<chem>C1=C(C=C(C=C1O)OC2=C(C=C(C=C2O)OC3=C(C=C(C(=C3O)OC4=C(C=C(C(=C4O)OC5=CC(=C(C(=C5)O)OC6=CC(=C(C(=C6)O)O)C7=CC(=C(C(=C7)O)OC8=C(C=C(C(=C8O)O)O)O)O)O)O)O)O)O</chem>
20	Senyawa 7	Fenolik		<chem>C1=C(C=C(C=C1O)OC2=C(C=C(C3=C2OC4=CC5=C(C(=C43)O)OC6=C(O5)C(=CC(=C6OC7=CC(=CC(=C7)O)O)O)O)O)O</chem>
21	Senyawa 8	Fenolik		<chem>C1=C(C=C(C=C1O)OC2=C(C=C(C3=C2OC4=C(C=C(C(=C4O3)O)O)O)OC5</chem>

				<chem>=C(C=C(C=C5O)O)O</chem>
22	Senyawa 9	Fenolik		<chem>C1(=CC(=CC(=C1)OC2=C(C=C(C4=C2OC3=C(C=C6C(=C3O4)C5=C(C=C(C=C5OC(C)=O)OC(C)=O)O6)OC(C)=O)OC(C)=O)OC(C)=O)OC(C)=O)OC(C)=O)OC(C)=O)O</chem>
23	Senyawa 10	Fenolik		<chem>C1=CC(=CC=C1C=CC(=O)O)O</chem>
24	Senyawa 11	Fenolik		<chem>C1=CC=C2C(=O)C=CC(=O)C2=C1</chem>
25	Senyawa 13	Fenolik		<chem>C1=C(C=CC2=C1OCC(C2=O)C3=CC=C(C=C3OC)OC)O</chem>
26	Senyawa 17	Fenolik		<chem>CC1=CC(=C(C(=C1)C(C)(C)C)O)CC2=C(C(=CC(=C2)C)C(C)(C)C)O</chem>
27	Senyawa 18	Fenolik		<chem>CC(C)(C)C1=CC(=CC(=C1)O[Si](C)(C)C)C(C)(C)C</chem>
28	Senyawa 19	Fenolik		<chem>C1=C(C=C(C=C1O)OC2=C(C=C(C=C2OC3=C(C=C(C=C3O)O)O)O)O)O</chem>
29	Senyawa 20	Fenolik		<chem>C1=C(C=C(C=C1O)OC2=C(C=C(C=C2O)OC3=C(C=C(C=C3O)OC4=C(C=C(C=C4O)O)O)O)O)O</chem>

30	Senyawa 22	Fenolik		C1=C(C=C(C(=C1 O)C2=C(C=C(C=C 2OC3=C(C=C(C=C 3OC4=C(C=C(C=C 4O)O)O)O)O)O O)O
----	------------	---------	---	---

**Tabel 44.** Lampiran data prediktif *Drug-Likeness* senyawa uji golongan Fenolik (SwissADME)

No	Senyawa	Lipinski	Ghose	Veber	Egan	Muegge
1	<i>Phloroglucinol</i>	Iya	Tidak	Iya	Iya	Tidak
2	<i>Fucophlorethol</i>	Iya	Iya	Tidak	Tidak	Tidak
3	<i>Fucodiphlorethol</i>	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
4	<i>Ergosterol</i>	Iya	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
5	<i>Dieckol</i>	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
6	<i>Eckol</i>	Iya	Iya	Tidak	Tidak	Tidak
7	<i>Diphlorethol</i>	Iya	Iya	Iya	Iya	Iya
8	<i>Coumarin</i>	Iya	Tidak	Iya	Iya	Tidak
9	<i>Lignin</i>	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
10	<i>Negletein</i>	Iya	Iya	Iya	Iya	Iya
11	<i>Wogonin</i>	Iya	Iya	Iya	Iya	Iya
12	<i>Aurantiamide Acetate</i>	Iya	Iya	Tidak	Iya	Iya
13	<i>Liquiritigenin</i>	Iya	Iya	Iya	Iya	Iya
14	<i>Anthraquinone</i>	Iya	Iya	Iya	Iya	Iya
15	Senyawa 1	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
16	Senyawa 2	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
17	Senyawa 3	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
18	Senyawa 4	Iya	Iya	Tidak	Tidak	Tidak
19	Senyawa 5	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
20	Senyawa 6	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
21	Senyawa 7	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
22	Senyawa 8	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
23	Senyawa 9	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
24	Senyawa 10	Iya	Iya	Iya	Iya	Tidak
25	Senyawa 11	Iya	Tidak	Iya	Iya	Tidak
26	Senyawa 13	Iya	Iya	Iya	Iya	Iya
27	Senyawa 17	Iya	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
28	Senyawa 18	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
29	Senyawa 19	Iya	Iya	Tidak	Tidak	Tidak
30	Senyawa 20	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
31	Senyawa 22	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak

**Tabel 45.** Lampiran data prediktif *Drug-likeness* senyawa uji golongan Fenolik (ADMETLab 2.0)

No	Senyawa	NP Score	Lipinski Rules	Pfizer Rules	GSK Rules	Golden Rules
----	---------	----------	----------------	--------------	-----------	--------------



1	<i>Phloroglucinol</i>	0.771	Iya	Iya	Iya	Tidak
2	<i>Fucophlorethol</i>	0.762	Iya	Iya	Iya	Iya
3	<i>Fucodiphlorethol</i>	0.748	Tidak	Iya	Tidak	Iya
4	<i>Ergosterol</i>	3.039	Iya	Tidak	Tidak	Tidak
5	<i>Dieckol</i>	0.814	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
6	<i>Eckol</i>	1.483	Iya	Iya	Iya	Iya
7	<i>Diphlorethol</i>	0.97	Iya	Iya	Iya	Iya
8	<i>Coumarin</i>	0.234	Iya	Iya	Iya	Tidak
9	<i>Lignin</i>	-0.674	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
10	<i>Negletein</i>	1.104	Iya	Iya	Iya	Iya
11	<i>Wogonin</i>	1.401	Iya	Iya	Iya	Iya
12	<i>Aurantiamide Acetate</i>	0.014	Iya	Iya	Tidak	Iya
13	<i>Liquiritigenin</i>	1.366	Iya	Iya	Iya	Iya
14	<i>Anthraquinone</i>	0.108	Iya	Tidak	Iya	Iya
15	Senyawa 1	0.641	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
16	Senyawa 2	1.161	Tidak	Iya	Tidak	Iya
17	Senyawa 3	1.12	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
18	Senyawa 4	1.102	Iya	Iya	Iya	Iya
19	Senyawa 5	0.907	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
20	Senyawa 6	0.278	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
21	Senyawa 7	1.304	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
22	Senyawa 8	1.254	Tidak	Iya	Tidak	Iya
23	Senyawa 9	0.566	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
24	Senyawa 10	0.841	Iya	Iya	Iya	Tidak
25	Senyawa 11	0.493	Iya	Iya	Iya	Tidak
26	Senyawa 13	1.18	Iya	Iya	Iya	Iya
27	Senyawa 17	0.182	Iya	Tidak	Tidak	Iya
28	Senyawa 18	-0.393	Iya	Tidak	Tidak	Tidak
29	Senyawa 19	0.947	Iya	Iya	Iya	Iya
30	Senyawa 20	0.525	Tidak	Iya	Tidak	Iya
31	Senyawa 22	0.748	Tidak	Iya	Tidak	Iya

**Tabel 46.** Lampiran data prediktif kemampuan ADME senyawa uji golongan Fenolik (pkCSM)

No	Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme		Ekskresi	
		Caco-2	HIA	Fu	Vd	BBB	2D6	3A4	Klirens	OCT-2
1	<i>Phloroglucinol</i>	1.10	83.54	0.71	0.13	-0.47	Tidak	Tidak	0.58	Tidak
2	<i>Fucophlorethol</i>	-1.25	54.93	0.25	0.57	-2.16	Tidak	Tidak	0.34	Tidak

3	<i>Fuco diphlorethol</i>	-0.46	45.1 3	0.29	-0.11	-2.21	Tidak	Tidak	0.23	Tidak
4	<i>Dieckol</i>	-0.97	68.8 9	-0.97	-0.22	-2.95	Tidak	Iya	-0.27	Tidak
5	<i>Eckol</i>	-0.20	67.2 7	0.08	0.60	-1.40	Tidak	Tidak	0.23	Tidak
6	<i>Diphlorethol</i>	- 0.93 3	70.9 32	0.39 8	0.99	-1.36	Tidak	Tidak	0.47	Tidak
7	<i>Coumarin</i>	1.65	97.3 4	0.37	-0.14	-0.01	Tidak	Tidak	0.97	Tidak
8	<i>Lignin</i>	-0.43	0	0.19	-1.64	-1.38	Tidak	Tidak	1.50	Tidak
9	<i>Negletein</i>	0.99	92.7 8	0.09	0.04	-0.24	Tidak	Iya	0.29	Iya
10	<i>Wogonin</i>	0.97	92.6 8	0.10	0.03	0.23	Tidak	Iya	0.29	Tidak
11	<i>Auran tiamide Acetate</i>	1.14	95.0	0	-0.02	-0.28	Tidak	Iya	0.62	Tidak
12	<i>Liquiritigenin</i>	1.14	94.3 3	0.10	0.22	0.38	Tidak	Tidak	0.07	Tidak
13	<i>Anthra quinone</i>	-4.63	0.01	1.42	0.82	0.15	Tidak	Tidak	Tidak	2.4
14	Senyawa 1	-0.64	78.3 5	0.37	-0.2	-3.03	Tidak	Iya	-0.35	Iya
15	Senyawa 2	-0.69	68.3 6	0.23	-0.32	-2.25	Tidak	Iya	0.09	Tidak
16	Senyawa 3	-0.66	94.0 1	0.36	-0.72	-2.54	Tidak	Iya	0.02	Tidak
17	Senyawa 4	-0.48	88.0 1	0.13	-0.61	-1.61	Tidak	Iya	0.38	Tidak
18	Senyawa 5	-1.86	87.5 4	0.38	-0.14	-3.38	Tidak	Iya	-0.29	Tidak
19	Senyawa 6	-3.14	91.3 6	0.38	-0.01	-4.95	Tidak	Iya	-0.17	Tidak
20	Senyawa 7	-0.64	88.6 4	0.36	-0.61	-2.61	Tidak	Iya	0.02	Tidak
21	Senyawa 8	-0.68	57.3 4	0.25	-0.44	-2.32	Tidak	Iya	0.13	Tidak
22	Senyawa 9	-1.20	100	0.43	-1.62	-3.40	Tidak	Iya	-1.47	Tidak
23	Senyawa 10	1.21	93.4 9	0.43	-1.15	-0.23	Tidak	Tidak	0.66	Tidak
24	Senyawa 11	-4.53	0.01	2.30	0.84	0.31	Iya	Iya	Tidak	3.21
25	Senyawa 13	1.22	96.0	0.04	-0.23	-0.42	Tidak	Iya	0.21	Iya
26	Senyawa 17	0.94	90.1 1	0	0.30	-0.16	Tidak	Iya	0.47	Tidak
27	Senyawa	1.90	92.8	0	0.81	0.64	Tidak	Iya	0.79	Tidak

	18		8							
28	Senyawa 19	-0.43	60.03	0.16	0.61	-1.78	Tidak	Tidak	0.38	Tidak
29	Senyawa 20	-1.72	79.53	0.31	-0.04	-2.64	Tidak	Iya	0.21	Tidak
30	Senyawa 22	-0.46	45.13	0.29	-0.11	-2.21	Tidak	Tidak	0.23	Tidak

**Tabel 47.** Lampiran data prediktif kemampuan ADME senyawa uji golongan Fenolik (ADMETLAB 2.0)

No	Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme			Ekresi
		Caco-2	HIA	Fu	Vd	BBB	2C9	2D6	3A4	Klirens
1	<i>Phloroglucinol</i>	-4.79	0.02	52.16	0.86	0.04	Iya	Iya	Tidak	14.92
2	<i>Fuco phlorethol</i>	-6.44	0.22	4.45	0.56	0.02	Iya	Tidak	Tidak	12.65
3	<i>Fuco diphlorethol</i>	-6.75	0.26	7.36	0.5	0.02	Iya	Tidak	Tidak	12.39
4	<i>Dieckol</i>	-6.84	0.80	13.42	0.06	0.002	Tidak	Tidak	Tidak	7.76
5	<i>Eckol</i>	-5.78	0.04	5.75	0.58	0.02	Iya	Tidak	Tidak	9.99
6	<i>Diphlorethol</i>	-5.59	0.01	7.35	0.68	0.02	Iya	Iya	Tidak	14.34
7	<i>Coumarin</i>	-4.58	0.01	12.25	0.83	0.17	Iya	Iya	Tidak	10.85
8	<i>Lignin</i>	-4.99	0.19	1.19	0.22	0.002	Iya	Tidak	Tidak	1.09
9	<i>Negletein</i>	-4.90	0.01	6.83	0.56	0.03	Iya	Tidak	Tidak	2.98
10	<i>Wogonin</i>	-4.88	0.01	5.99	0.56	0.01	Iya	Tidak	Tidak	4.51
11	<i>Aurantamide Acetate</i>	-4.97	0.55	3.98	0.42	0.11	Tidak	Tidak	Iya	2.01
12	<i>Liquiritigenin</i>	-4.63	0.01	6.27	0.44	0.08	Iya	Tidak	Tidak	6.72
13	<i>Anthraquinone</i>	-4.63	0.01	1.42	0.82	0.15	Tidak	Tidak	Tidak	2.4
14	Senyawa 1	-6.92	0.65	13.33	0.2	0.002	Iya	Tidak	Tidak	9.67
15	Senyawa 2	-6.37	0.09	7.47	0.44	0.01	Iya	Tidak	Tidak	10.02
16	Senyawa 3	-6.27	0.35	14.74	0.39	0.004	Iya	Tidak	Tidak	12.35
17	Senyawa	-5.41	0.13	23.9	0.6	0.01	Iya	Tidak	Tidak	6.40

	4			6	7					
18	Senyawa 5	-6.97	0.58	11.01	0.15	0.001	Tidak	Tidak	Tidak	12.14
19	Senyawa 6	-7.35	0.83	17.11	-0.21	0.0	Iya	Tidak	Tidak	9.58
20	Senyawa 7	-6.29	0.37	14.27	0.38	0.003	Iya	Tidak	Tidak	9.48
21	Senyawa 8	-6.33	0.12	7.64	0.47	0.01	Iya	Tidak	Tidak	1.02
22	Senyawa 9	-5.26	1.00	21.30	0.67	0.03	Iya	Tidak	Tidak	6.30
23	Senyawa 10	-4.96	0.01	13.72	0.29	0.29	Iya	Iya	Iya	5.46
24	Senyawa 11	-4.53	0.01	2.30	0.84	0.31	Iya	Iya	Tidak	3.21
25	Senyawa 13	-4.80	0.004	1.99	0.55	0.10	Iya	Iya	Iya	9.77
26	Senyawa 17	-5.69	0.95	1.14	2.75	0.06	Iya	Iya	Iya	3.67
27	Senyawa 18	-5.13	0.97	1.35	5.46	0.27	Iya	Tidak	Tidak	13.18
28	Senyawa 19	-6.17	0.02	6.79	0.60	0.02	Iya	Tidak	Tidak	12.64
29	Senyawa 20	-6.59	0.08	7.50	0.46	0.01	Iya	Tidak	Tidak	12.39
30	Senyawa 22	-6.75	0.26	7.36	0.5	0.02	Iya	Tidak	Tidak	12.64

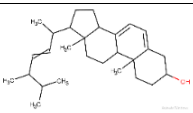
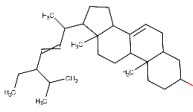
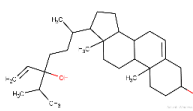
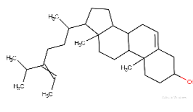
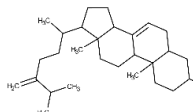
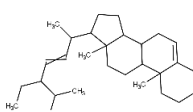
**Tabel 48.** Lampiran data prediktif toksisitas senyawa uji golongan Fenolik

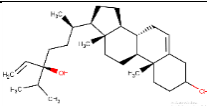
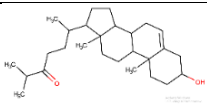
No	Senyawa	Genotoksik	non-Genotoksik	Ames-test
1	<i>Phloroglucinol</i>	Tidak	Tidak	Tidak
2	<i>Fucophlorethol</i>	Tidak	Tidak	Tidak
3	<i>Fucodiphlorethol</i>	Tidak	Tidak	Tidak
4	<i>Dieckol</i>	Tidak	Tidak	Tidak
5	<i>Eckol</i>	Tidak	Tidak	Tidak
6	<i>Diphlorethol</i>	Tidak	Tidak	Tidak
7	<i>Coumarin</i>	Iya	Tidak	Tidak
8	<i>Lignin</i>	Iya	Tidak	Tidak
9	<i>Negletein</i>	Tidak	Tidak	Tidak
10	<i>Wogonin</i>	Tidak	Tidak	Tidak
11	<i>Aurantiamide Acetate</i>	Tidak	Tidak	Tidak
12	<i>Liquiritigenin</i>	Tidak	Tidak	Tidak
13	<i>Anthraquinone</i>	Iya	Iya	Iya
14	Senyawa 1	Tidak	Tidak	Tidak
15	Senyawa 2	Tidak	Tidak	Tidak
16	Senyawa 3	Iya	Iya	Tidak
17	Senyawa 4	Iya	Iya	Iya

18	Senyawa 5	Tidak	Tidak	Tidak
19	Senyawa 6	Tidak	Tidak	Tidak
20	Senyawa 7	Iya	Iya	Tidak
21	Senyawa 8	Tidak	Tidak	Tidak
22	Senyawa 9	Iya	Iya	Tidak
23	Senyawa 10	Tidak	Iya	Tidak
24	Senyawa 11	Iya	Iya	Tidak
25	Senyawa 13	Tidak	Tidak	Iya
26	Senyawa 17	Tidak	Tidak	Tidak
27	Senyawa 18	Tidak	Tidak	Tidak
28	Senyawa 19	Tidak	Tidak	Tidak
29	Senyawa 20	Tidak	Tidak	Tidak
30	Senyawa 22	Tidak	Tidak	Tidak

### c) Steroid

**Tabel 49.** Data Senyawa Uji Golongan Steroid

No	Identitas Senyawa	Golongan	Struktur	SMILES
1	<i>Ergosterol</i>	Steroid		<chem>CC(C)C(C)C=CC(C)C1CCC2C1(CCC3C2=CC=C4C3(CC(C4)O)C)C</chem>
2	<i>Chondrillasterol</i>	Steroid		<chem>CCC(C=CC(C)C1CCC2C1(CCC3C2=CCC4C3(CCC(C4)O)C)C)C(C)C</chem>
3	<i>Saringosterol</i>	Steroid		<chem>CC(C)C(CCC(C)C1CCC2C1(CCC3C2CC=C4C3(CCC(C4)O)C)C)(C=C)O</chem>
4	<i>Fucosterol</i>	Steroid		<chem>CC=C(CCC(C)C1CCC2C1(CCC3C2C=C4C3(CCC(C4)O)C)C)C(C)C</chem>
5	<i>Episterol</i>	Steroid		<chem>CC(C)C(=C)CCC(C)C1CCC2C1(CCC3C2=CCC4C3(CCC(C4)O)C)C</chem>
6	<i>Stigmasterol</i>	Steroid		<chem>CCC(C=CC(C)C1CCC2C1(CCC3C2C=C4C3(CCC(C4)O)C)C)C(C)C</chem>

7	Senyawa 14	Steroid		<chem>C4[C@]1(C(=CC[C@@H]2[C@@H]1CC[C@]3([C@H]2CC[C@@H]3[C@@H])(CC[C@](C(C)C)(C=C)O)C)CC(C4)O)C</chem>
8	Senyawa 15	Steroid		<chem>CC(C)C(=O)CCC(C)C1CCC2C1(CCC3C2CC=C4C3(CCC(C4)O)C)C</chem>

**Tabel 50.** Lampiran data prediktif *Drug-Likeness* senyawa uji golongan steroid (SwissADME)

No	Senyawa	Lipinski	Ghose	Veber	Egan	Muegge
1	<i>Ergosterol</i>	Iya	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
2	<i>Chondrillasterol</i>	Iya	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
3	<i>Saringosterol</i>	Iya	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
4	<i>Fucosterol</i>	Iya	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
5	<i>Episterol</i>	Iya	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
6	<i>Stigmasterol</i>	Iya	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
7	Senyawa 14	Iya	Tidak	Iya	Tidak	Tidak
8	Senyawa 15	Iya	Tidak	Iya	Tidak	Tidak

**Tabel 51.** Lampiran data prediktif *Drug-likeness* senyawa uji golongan steroid (ADMETLab 2.0)

No	Senyawa	NP Score	Lipinski Rules	Pfizer Rules	GSK Rules	Golden Rules
1	<i>Ergosterol</i>	3.039	Iya	Tidak	Tidak	Tidak
2	<i>Chondrillasterol</i>	2.85	Iya	Tidak	Tidak	Tidak
3	<i>Saringosterol</i>	2.772	Iya	Tidak	Tidak	Tidak
4	<i>Fucosterol</i>	2.897	Iya	Tidak	Tidak	Tidak
5	<i>Episterol</i>	3.018	Iya	Tidak	Tidak	Tidak
6	<i>Stigmasterol</i>	2.802	Iya	Tidak	Tidak	Tidak
7	Senyawa 14	2.772	Iya	Tidak	Tidak	Tidak
8	Senyawa 15	2.628	Iya	Tidak	Tidak	Tidak

**Tabel 52.** Lampiran data prediktif kemampuan ADME senyawa uji golongan steroid (pkCSM)

No	Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme		Ekskresi	
		Caco-2	HIA	Fu	Vd	BBB	2D6	3A4	Klirens	OCT-2
1	<i>Ergosterol</i>	1.24	95.20	0	0.41	0.77	Tidak	Iya	0.56	Tidak
2	<i>Chondrilla sterol</i>	1.21	94.97	0	0.18	0.77	Tidak	Iya	0.61	Tidak

3	<i>Saringosterol</i>	1.18	92.96	0	0.14	-0.30	Tidak	Iya	0.67	Tidak
4	<i>Fucosterol</i>	1.21	94.64	0	0.18	0.76	Tidak	Iya	0.76	Tidak
5	<i>Episterol</i>	1.22	94.69	0	0.43	0.78	Tidak	Iya	0.60	Tidak
6	<i>Stigma sterol</i>	1.21	94.97	0	0.18	0.77	Tidak	Iya	0.62	Tidak
7	Senyawa 14	1.15	91.50	0	0.00 4	-0.18	Tidak	Iya	0.67	Tidak
8	Senyawa 15	1.44	95.87	0	0.09	-0.15	Tidak	Iya	0.59	Tidak

**Tabel 53.** Lampiran data prediktif kemampuan ADME senyawa uji golongan steroid (ADMETLab 2.0)

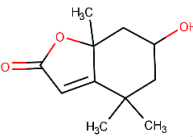
No	Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme			Ekskresi
		Caco-2	HIA	Fu	Vd	BBB	2C9	2D6	3A4	Klirens
1	<i>Ergosterol</i>	-4.75	0.01	1.63	1.3 9	0.62	Tidak	Tidak	Iya	15.23
2	<i>Chondrilla sterol</i>	-4.62	0.01	1.15	1.5 9	0.88	Tidak	Iya	Iya	16.36
3	<i>Saringosterol</i>	-4.70	0.01	2.12	1.2	0.96	Tidak	Iya	Iya	14.58
4	<i>Fucosterol</i>	-4.62	0.00 4	1.78	2.7 8	0.82	Tidak	Iya	Iya	13.30
5	<i>Episterol</i>	-4.66	0.01	1.36	1.2 4	0.94	Tidak	Iya	Tidak	14.21
6	<i>Stigma sterol</i>	-4.67	0.01	1.57	2.4 1	0.69	Tidak	Tidak	Iya	15.96
7	Senyawa 14	-4.58	0.00 3	1.30	1.1 4	0.76	Tidak	Tidak	Iya	7.96
8	Senyawa 15	-4.73	0.01	1.64	1.4 4	0.94	Tidak	Iya	Iya	19.25

**Tabel 54.** Lampiran data prediktif toksisitas senyawa uji golongan steroid

No	Senyawa	Genotoksik	Non-Genotoksik	Ames-test
1	<i>Ergosterol</i>	Tidak	Tidak	Tidak
2	<i>Chondrilla sterol</i>	Tidak	Tidak	Tidak
3	<i>Saringosterol</i>	Tidak	Tidak	Tidak
4	<i>Fucosterol</i>	Tidak	Tidak	Tidak
5	<i>Episterol</i>	Tidak	Tidak	Tidak
6	<i>Stigmasterol</i>	Tidak	Tidak	Tidak
7	Senyawa 14	Tidak	Tidak	Tidak
8	Senyawa 15	Tidak	Tidak	Tidak

#### d) Benzofuran

**Tabel 55.** Data Senyawa Uji Golongan Benzofuran

No	Identitas Senyawa	Golongan	Struktur	SMILES
1	Senyawa 12	Benzofuran		CC1(CC(CC2(C1=CC(=O)O2)C)O)C

**Tabel 56.** Lampiran data prediktif *Drug-Likeness* senyawa uji golongan benzofuran (SwissADME)

No	Senyawa	Lipinski	Ghose	Veber	Egan	Muegge
1	Senyawa 12	Iya	Iya	Iya	Iya	Tidak

**Tabel 57.** Lampiran data prediktif *Drug-likeness* senyawa uji golongan benzofuran (ADMETLab 2.0)

No	Senyawa	NP Score	Lipinski Rules	Pfizer Rules	GSK Rules	Golden Rules
1	Senyawa 12	2.982	Iya	Iya	Iya	Tidak

**Tabel 58.** Lampiran data prediktif kemampuan ADME senyawa uji golongan benzofuran (pkCSM)

No	Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme		Ekskresi	
		Caco-2	HIA	Fu	Vd	BBB	2D6	3A4	Klirens	OCT-2
1	Senyawa 12	1.23	95.9	0.61	0.11	0.18	Tidak	Tidak	1.04	Tidak
		9	35	4	7	9			2	

**Tabel 59.** Lampiran data prediktif kemampuan ADME senyawa uji golongan benzofuran (*Server tools* ADMETLab 2.0)

No	Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme			Ekskresi
		Caco-2	HIA	FU	Vd	BBB	2C9	2D6	3A4	Klirens (ml/min/kg)
1	Senyawa 12	-4.61	0.01	58.1	1.3	0.99	Tidak	Tidak	Tidak	8.81
				5	5					

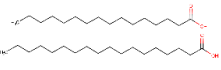

**Tabel 60.** Lampiran data prediktif toksisitas senyawa uji golongan benzofuran

No	Senyawa	Genotoksik	Non-Genotoksik	Ames-test
1	Senyawa 12	Iya	Iya	Tidak

### e) Asam lemak

**Tabel 61.** Data Senyawa Uji Golongan Asam Lemak



No	Identitas Senyawa	Golongan	Struktur	SMILES
1	<i>Palmitic Acid</i>	Asam Lemak		CCCCCCCCCCCC CCCCC(=O)O.C CCCCCCCCCCCC CCC(=O)O
2	<i>Octadecatetraenoic acid</i>	Asam Lemak		CCCCCCCCC=C C=CC=CC(=O) O

**Tabel 62.** Lampiran data prediktif *Drug-Likeness* senyawa uji golongan Asam Lemak (SwissADME)

No	Senyawa	Lipinski	Ghose	Veber	Egan	Muegge
1	<i>Palmitic Acid</i>	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
2	<i>Octadecatetraenoic acid</i>	Iya	Iya	Tidak	Iya	Tidak

**Tabel 63.** Lampiran data prediktif *Drug-likeness* senyawa uji golongan Asam Lemak (ADMETLab 2.0)

No	Senyawa	NP Score	Lipinski Rules	Pfizer Rules	GSK Rules	Golden Rules
1	<i>Palmitic Acid</i>	0.183	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
2	<i>Octadecatetraenoic acid</i>	1.374	Iya	Tidak	Tidak	Iya

**Tabel 64.** Lampiran data prediktif kemampuan ADME senyawa uji golongan Asam Lemak (*Server tools* pkCSM)

No	Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme		Ekskresi	
		Caco-2	HIA	Fu	Vd	BBB	2D6	3A4	Klirens	OCT-2
1	<i>Palmitic Acid</i>	-0.38	85.06	0.14	-1.2	-0.76	Tidak	Iya	1.88	Tidak
2	<i>Octadecatetraenoic acid</i>	1.58	93.34	0.06	-0.65	-0.09	Tidak	Iya	2.07	Tidak

**Tabel 65.** Lampiran data prediktif kemampuan ADME senyawa uji golongan Asam Lemak (*Server tools* ADMETLab 2.0)

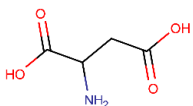
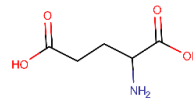
No	Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme			Ekskresi
		Caco-2	HIA	Fu	Vd	BBB	2C9	2D6	3A4	Klirens
1	<i>Palmitic Acid</i>	-5.25	0.01	0.27	1.10	0.0	Iya	Tidak	Tidak	2.07
2	<i>Octadecatetraenoic acid</i>	-4.79	0.01	1.6	0.56	0.6	Iya	Tidak	Tidak	0.75

<i>etraenoic acid</i>	4
-----------------------	---

**Tabel 66.** Lampiran data prediktif toksisitas senyawa uji golongan Asam Lemak

No	Senyawa	Genotoksik	Non-Genotoksik	Ames-test
1	<i>Palmitic Acid</i>	Tidak	Tidak	Tidak
2	<i>Octadecatetraenoic acid</i>	Tidak	Tidak	Tidak

**f) Asam Amino****Tabel 67.** Data Senyawa Uji Golongan Asam Amino

No	Identitas Senyawa	Golongan	Struktur	SMILES
1	<i>Aspartat Acid</i>	Asam Amino		<chem>C(C(C(=O)O)N)C(=O)O</chem>
2	<i>Glutamic Acid</i>	Asam Amino		<chem>C(CC(=O)O)C(C(=O)O)N</chem>

**Tabel 68** Lampiran data prediktif *Drug-Likeness* senyawa uji golongan Asam Amino (SwissADME)

No	Senyawa	Lipinski	Ghose	Veber	Egan	Muegge
1	<i>Aspartat Acid</i>	Iya	Tidak	Iya	Iya	Tidak
2	<i>Glutamic Acid</i>	Iya	Tidak	Iya	Iya	Tidak

**Tabel 69.** Lampiran data prediktif *Drug-Likeness* senyawa uji golongan Asam Amino (ADMETLab 2.0)

No	Senyawa	NP Score	Lipinski Rules	Pfizer Rules	GSK Rules	Golden Rules
1	<i>Aspartat Acid</i>	1.08	Iya	Iya	Iya	Tidak
2	<i>Glutamic Acid</i>	1.316	Iya	Iya	Iya	Tidak

**Tabel 70.** Lampiran data prediktif kemampuan ADME senyawa uji golongan Asam Amino (*Server tools* pkCSM)

No	Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme		Ekskresi	
		Caco-2	HIA	Fu	Vd	BBB	2D6	3A4	Klirens	OCT-2
1	<i>Aspartat Acid</i>	-0.50	17.95	0.46	-0.43	-0.71	Tidak	Tidak	0.15	Tidak
2	<i>Glutamic Acid</i>	-0.49	29.98	0.41	-0.29	-0.69	Tidak	Tidak	0.21	Tidak

**Tabel 71.** Lampiran data prediktif kemampuan ADME senyawa uji golongan Asam Amino (*Server tools ADMETLab 2.0*)

No	Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme			Ekskresi
		Caco -2	HIA	Fu	Vd	BBB	2C9	2D6	3A4	Klirens
1	<i>Aspartat Acid</i>	-6.17	0.01	84. 22	0.29	0.36	Iya	Tidak	Tidak	9.45
2	<i>Glutamic Acid</i>	-6.08	0.02	80. 64	0.32	0.43	Tidak	Tidak	Tidak	8.08

**Tabel 72.** Lampiran data prediktif toksisitas senyawa uji golongan Asam Amino

No	Senyawa	Genotoksik	Non-genotoksik	Amest Test
1	<i>Glutamic Acid</i>	Tidak	Tidak	Tidak
2	<i>Octadecatetraenoic acid</i>	Tidak	Iya	Tidak

## Lampiran 2. Dokumentasi Penelitian

