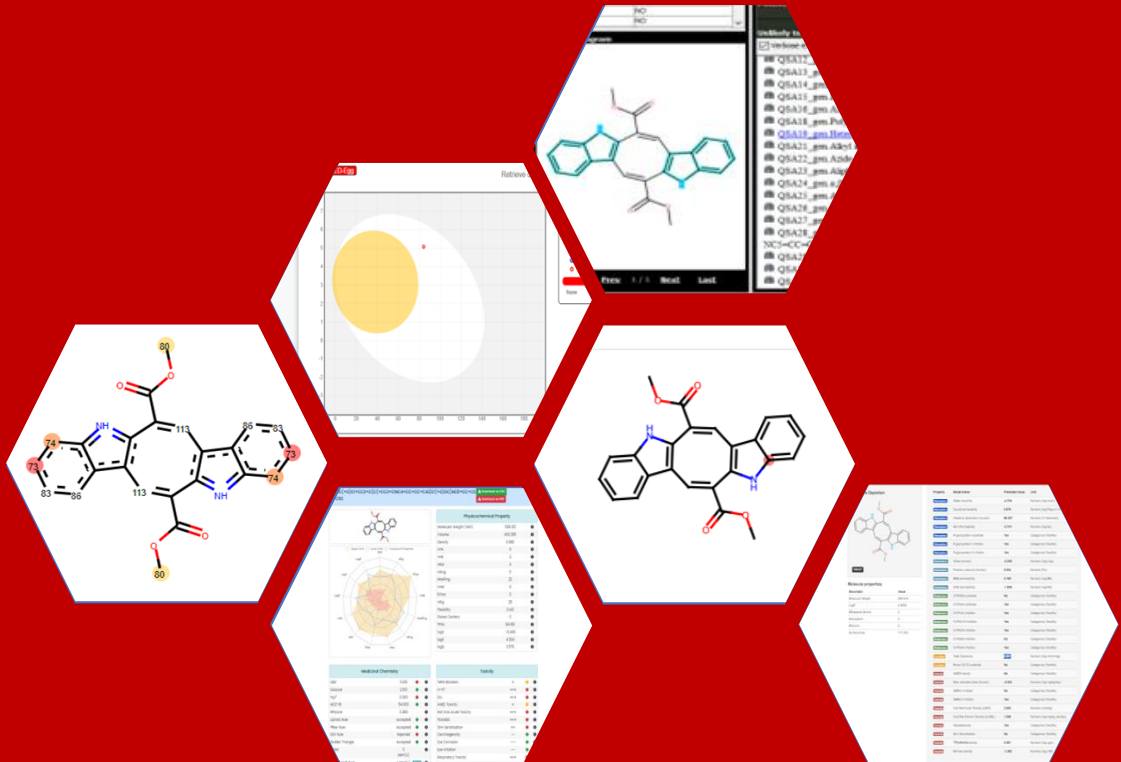


**PREDIKSI ADMET SENYAWA-SENYAWA BIOAKTIF DARI ALGA
LAUT *Caulerpa* sp.**



**MARWAH WIRDA NINGSIH
N011201070**



**PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS HASANUDDIN
MAKASSAR**

2024

PREDIKSI ADMET SENYAWA-SENYAWA BIOAKTIF DARI ALGA LAUT
Caulerpa sp.

MARWAH WIRDA NINGSIH
N011201070



PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS HASANUDDIN
MAKASSAR
2024



Optimization Software:
www.balesio.com

**PREDIKSI ADMET
SENYAWA-SENYAWA BIOAKTIF DARI ALGA LAUT *Caulerpa* sp.**

MARWAH WIRDA NINGSIH
N011201070

Skripsi

Sebagai salah satu syarat untuk mencapai gelar sarjana

Profram Studi Farmasi

pada

**PROGRAM STUDI FARMASI
FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS HASANUDDIN
MAKASSAR
2024**



Optimization Software:
www.balesio.com

SKRIPSI
PREDIKSI ADMET
SENYAWA-SENYAWA BIOAKTIF DARI ALGA LAUT *Caulerpa sp.*

MARWAH WIRDA NINGSIH
N011201070

Skripsi,

telah dipertahankan di hadapan Panitia Ujian Skripsi
Fakultas Farmasi Universitas Hasanuddin
pada tanggal 29 Mei 2024
dan dinyatakan telah memenuhi syarat kelulusan



Mengesahkan:

Pembimbing Utama,

Muhammad Aswad, S.Si., M.Si., Ph.D., Apt.
NIP. 19800101 200312 1 004

Pembimbing Pendamping,

Rina Agustina, S.Si., M.Pharm.Sc., Ph.D., Apt.
NIP. 19840821 201012 2 005

Mengetahui:

Wakil Dekan Bidang Akademik dan Kemahasiswaan,
Fakultas Farmasi Universitas Hasanuddin

Abd. Rahim, S.Si., M.Si., Ph.D., Apt
NIP. 19771111 200812 1 001



PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Dengan ini saya menyatakan, skripsi berjudul "Prediksi ADMET Senyawa-Senyawa Bioaktif Dari Alga Laut *Caulerpa* sp." adalah benar karya saya dengan arahan dari pembimbing Bapak Muhammad Aswad, S.Si., M.Si., Ph.D., Apt. selaku pembimbing utama dan Ibu Rina Agustina, S.Si., M.Si., Ph.D., Apt. selaku pembimbing pendamping. Karya ilmiah ini belum diajukan dan tidak sedang diajukan dalam bentuk apa pun kepada perguruan tinggi mana pun. Sumber informasi yang berasal atau dikutip dari karya yang diterbitkan maupun tidak diterbitkan dari penulis lain telah disebutkan dalam teks dan dicantumkan dalam Daftar Pustaka skripsi ini. Apabila di kemudian hari terbukti atau dapat dibuktikan bahwa sebagian atau keseluruhan skripsi ini adalah karya orang lain, maka saya bersedia menerima sanksi atas perbuatan tersebut berdasarkan aturan yang berlaku.

Dengan ini saya melimpahkan hak cipta (hak ekonomis) dari karya tulis saya berupa skripsi ini kepada Universitas Hasanuddin.



Makassar, Mei 2024
Yang menyatakan,

Marwah Wirda Ningsih
N011201070



UCAPAN TERIMA KASIH

Puji dan syukur penulis panjatkan kehadiran Tuhan Yang Maha Esa atas berkat dan rahmat-Nya, sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul "PREDIKSI ADMET SENYAWA-SENYAWA BIOAKTIF DARI ALGA LAUT *Caulerpa* sp." dengan baik.

Dalam penyusunan skripsi ini penulis menyadari terdapat berbagai hambatan dan rintangan, namun berkat bantuan dari berbagai pihak atas segala doa, dukungan moral, materil, serta selalu memberikan semangat kepada penulis, skripsi ini dapat diselesaikan dengan baik.

Penulis juga ingin mengucapkan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada:

1. Bapak Muhammad Aswad, S.Si., M.Si, Ph.D., Apt. selaku pembimbing utama dan Ibu Rina Agustina, S.Si., M.Pharm.Sc., Ph.D., Apt. selaku pembimbing pendamping dengan ikhlas dan sabar telah meluangkan waktu, tenaga, serta ilmu dan arahan dalam penelitian dan membimbing penulis dalam penyusunan skripsi ini.
2. Bapak Dr. Syaharuddin Kasim, M.Si. dan Ibu Yuyu Mulsiani Evary, S.Si, M.Si., Apt. selaku tim penguji yang telah meluangkan waktu dan memberikan saran yang membangun dalam penyusunan skripsi ini.
3. Ibu Yuyu Mulsiani Evary, S.Si, M.Si., Apt. selaku dosen pembimbing akademik penulis atas segala ilmu dan arahan selama penulis menempuh menjalani studi.
4. Bapak Hairan Subaera dan Ibu Wiji Hastuti selaku orang tua penulis, serta Fikram, Udin, dan Kak Yati selaku saudara penulis yang sudah memberikan semangat, selalu mendoakan, dan selalu ada di setiap saat penulis membutuhkan dukungan dalam menyelesaikan skripsi ini.
5. Teman-teman Chemist 20 atas segala support, ilmu, dan bantuan yang telah banyak diberikan kepada penulis. Terkhusus kepada Pak Fandi dan Ibu Juli atas nasihat, arahan, dan support yang diberikan kepada penulis selama menjadi asisten dan menempuh studi di Fakultas Farmasi.
6. Sahabat-sahabat penulis, yaitu Kindi, Alifiah, Faizal, Riry, Diah, Kak Maya, Kak Alea, Kak Rezky, dan Gilang yang sudah bersama penulis membantu menyelesaikan skripsi ini.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih jauh dari kata sempurna. Oleh karena itu, penulis sangat mengharapkan adanya saran maupun tanggapan dari berbagai pihak sehingga dapat menjadikan skripsi ini ke arah yang lebih baik.

Semoga skripsi ini dapat bermanfaat demi pengembangan ilmu pengetahuan dan dipergunakan sebaik-baiknya.

Penulis,



Marwah Wirda Ningsih



ABSTRAK

MARWAH WIRDA NINGSIH. **Prediksi ADMET senyawa-senyawa bioaktif dari alga laut *Caulerpa* sp.** (dibimbing oleh Muhammad Aswad, S.Si., M.Si, Ph.D., Apt. dan Rina Agustina, S.Si., M.Si., Ph.D., Apt.).

Latar belakang. Pengembangan kandidat obat baru memerlukan proses yang lama dan biaya yang besar. Oleh karena itu, metode *in silico* dapat digunakan untuk memprediksi profil ADMET (absorpsi, distribusi, metabolisme, ekskresi, dan toksisitas) berdasarkan struktur kimia senyawa dengan cepat dan akurat. Hal ini memungkinkan seleksi awal senyawa-senyawa yang berpotensi sebagai obat dengan mempertimbangkan konsep *drug-likeness* dan prediksi farmakokinetika serta toksisitas. **Tujuan.** Penelitian ini bertujuan untuk memprediksi profil ADMET berdasarkan struktur 2 dimensi dari senyawa-senyawa *Caulerpa*, serta mengidentifikasi senyawa-senyawa potensial yang dapat dikembangkan sebagai obat. **Metode.** 90 senyawa *Caulerpa* sp. dengan bentuk dua dimensi dikonversi ke format SMILES dan dianalisis *drug-likeness* obat oral, profil farmakokinetika dan toksisitas dengan *web tools* SwissADME, ADMETLab 2.0., pkCSM, SmartCyp, dan Toxtree. **Hasil.** Penelitian ini mengungkap variasi dalam potensi farmakokinetika dan toksisitas dari senyawa-senyawa fenolik, alkaloid, terpenoid, dan steroid. Meskipun beberapa senyawa fenolik menunjukkan potensi sebagai obat oral, sebagian besar tidak memenuhi standar *drug-likeness* yang diinginkan serta berpotensi toksik yang tinggi. Sebaliknya, mayoritas senyawa alkaloid memenuhi kriteria sebagai obat oral, meskipun ada yang memiliki penyerapan rendah dan mayoritas senyawa alkaloid memiliki potensi toksik. Disisi lain, senyawa terpenoid menunjukkan profil farmakokinetika yang baik serta menunjukkan tingkat toksisitas yang beragam. Berbeda halnya dengan steroid, menunjukkan profil farmakokinetika yang beragam serta adanya kecenderungan tidak bersifat mutagenik. **Kesimpulan.** Dari total 90 senyawa yang dianalisis, hanya senyawa 51 dari golongan terpenoid memenuhi semua kriteria *drug-likeness* dan memiliki profil farmakokinetik yang memuaskan. Temuan ini menunjukkan bahwa senyawa 51 memiliki potensi sebagai kandidat obat di masa depan.

Kata kunci: *Caulerpa* sp.; prediksi ADMET; farmakokinetika; *drug-likeness*; toksisitas



Optimization Software:
www.balesio.com

ABSTRACT

MARWAH WIRDA NINGSIH. **ADMET prediction of bioactive compounds from marine algae *Caulerpa* sp.** (supervised by Muhammad Aswad, S.Si., M.Si., Ph.D., Apt. and Rina Agustina, S.Si., M.Pharm.Sc., Ph.D., Apt.)

Background. The development of new drug candidates requires a lengthy and costly process. Therefore, *in silico* methods can be used to rapidly and accurately predict the ADMET (absorption, distribution, metabolism, excretion, and toxicity) profile based on the chemical structure of compounds, allowing for the preliminary selection of compounds with potential as drugs by considering drug-likeness concepts and predicting pharmacokinetics and toxicity. **Aims.** This study aims to predict the ADMET profiles based on the 2D structure of *Caulerpa* compounds, as well as to identify potential compounds that can be developed as drugs. **Methods.** 90 compounds of *Caulerpa* sp. in 2D form were converted to SMILES format and analyzed for oral drug-likeness, pharmacokinetic and toxicity profile using the SwissADME, ADMETLab 2.0., pkCSM, SmartCyp, and ToxTree web tools. **Results.** The study revealed variations in the pharmacokinetic and toxicity potentials of phenolic, alkaloid, terpenoid, and steroid compounds. While some phenolic compounds showed potential as oral drugs, most did not meet the desired drug-likeness standards and had high toxicity potential. Conversely, most alkaloid compounds met the criteria for oral drugs, although some had low absorption and high toxicity potential. Terpenoid compounds showed good pharmacokinetic profiles and varied toxicity levels. Steroids showed diverse pharmacokinetic profiles and tended to be non-mutagenic. **Conclusion.** Out of a total of 90 compounds analyzed, only compound 51 from terpenoid group met all drug-likeness criteria and had a satisfactory pharmacokinetic profile. These findings suggest that compound 51 has potential as a future drug candidate.

Keywords: *Caulerpa* sp; ADMET prediction; Pharmacokinetics; Drug-likeness; Toxicity



Optimization Software:
www.balesio.com

DAFTAR ISTILAH, SINGKATAN, DAN LAMBANG


Istilah/singkatan	Arti dan penjelasan
<i>Drug-likeness</i>	Kemiripan berbagai sifat antara senyawa dengan obat-obat yang telah tersedia.
Farmakokinetika	Ilmu yang mempelajari tentang perjalanan obat dalam tubuh, atau mengenai kinetika absorpsi, distribusi, dan eliminasi obat (yaitu, metabolisme dan ekskresi) dalam tubuh.
Toksistasitas	Tingkat merusaknya suatu zat jika dipaparkan terhadap substansi biologis.
Absorpsi	Proses masuknya obat dari tempat pemberiannya ke sirkulasi sistemik.
Distribusi	Proses molekul obat yang telah memasuki sistem vaskular melewati dari aliran darah ke berbagai jaringan dan organ.
Metabolisme	Konversi kimia dari molekul obat, biasanya melalui reaksi yang dimediasi secara enzimatik, menjadi entitas kimia lain yang disebut sebagai metabolit.
Ekskresi	Pembuangan obat dari tubuh secara ireversibel dan biasanya terjadi melalui ginjal atau saluran empedu.
<i>Natural product score (NPscore)</i>	Kemiripan senyawa dengan produk alam.
Berat molekul	Jumlah massa atom dari semua atom dalam molekul.
<i>Topological polar surface area (TPSA)</i>	Total ikatan hidrogen donor dan akseptor yang menunjukkan probabilitas transpor pasif obat melalui saluran pencernaan dan penghalang biologis lainnya.
Ikatan hidrogen donor	Atom yang sangat elektronegatif (seperti N, O, atau F) yang terikat secara kovalen pada ikatan hidrogen.
Ikatan hidrogen akseptor	Atom elektronegatif dari molekul atau ion dari molekul atau ion yang berdekatan, yang memiliki satu pasang elektron yang berkontribusi dalam membentuk ikatan hidrogen.
LogP	Nilai yang menunjukkan sifat hidrofilik atau hidrofobik suatu molekul.
Lipofilik	Memiliki kecenderungan untuk bercampur dengan atau larut dalam lipid atau lemak.
Hidrofilik	Memiliki kecenderungan untuk bercampur dengan atau larut dalam air.
Bioavailabilitas	Suatu zat atau obat menjadi sepenuhnya tersedia untuk tujuan biologis yang dimaksudkan.
Sel Caco-2	Sel epitel manusia yang diambil dari karsinoma kolorektal yang berasal dari kolon.
<i>estinal</i>	Proses obat oral yang diabsorpsi dari usus kecil ke sirkulasi sistemik.
(u)	Jumlah fraksi senyawa atau obat yang tidak berikatan dengan protein plasma.
(D)	Parameter yang mengevaluasi distribusi obat di dalam tubuh setelah dosis diberikan. Dinyatakan dalam liter



	(L) atau mililiter (mL), dihitung dengan membagi jumlah obat dalam tubuh dengan konsentrasi obat dalam plasma darah
<i>Blood-Brain Barrier</i> (BBB)	Penghalang biologis otak yang mengatur pertukaran zat antara kompartemen otak dan darah.
CYP450	Enzim pemetabolisme senyawa atau obat.
Total klirens	Hasil dari semua ekskresi tubuh.
Transporter OCT2	Transporter utama dalam eliminasi kation organik.
Uji Ames	Uji potensi mutagenik suatu senyawa dengan menggunakan strain bakteri.
Mutagenik	Agen fisika atau kimia yang dapat merubah materi genetik.
Karsinogenik	Substansi yang berpotensi menyebabkan kanker.
Sifat Genotoksik	Substansi yang dapat berikatan langsung dengan DNA yang menyebabkan kerusakan DNA.
Sifat Nongenotoksik	Substansi yang dapat merusak DNA dengan mekanisme sekunder yang tidak berikatan langsung dengan DNA.



DAFTAR ISI

	Halaman
UCAPAN TERIMA KASIH	i
ABSTRAK	ii
ABSTRACT	iii
DAFTAR ISTILAH, SINGKATAN, DAN LAMBANG	iv
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
BAB I. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan Penelitian	2
BAB II. METODE PENELITIAN	3
2.1 Alat dan Bahan	3
2.2 Metode Kerja	3
2.2.1 Preparasi sampel	3
2.2.2 Prediksi ADMET	3
2.2.3 Prediksi toksisitas	3
2.2.4 Analisis data	3
BAB III. HASIL DAN PEMBAHASAN	4
3.1 Hasil	4
3.1.1 Golongan fenolik	4
3.1.2 Golongan alkaloid	6
3.1.3 Golongan terpenoid	7
3.1.4 Golongan steroid	9
 netika	12
Optimization Software: k	12
www.balesio.com	13
	15
	16

3.2.4.1 <i>Drug-likeness</i> dan profil farmakokinetika	16
3.2.4.2 Profil toksisitas	18
3.2.5 Golongan alkaloid	19
3.2.5.1 <i>Drug-likeness</i> dan profil farmakokinetika	19
3.2.5.2 Profil toksisitas	22
3.2.6 Golongan terpenoid	23
3.2.6.1 <i>Drug-likeness</i> dan profil farmakokinetika	23
3.2.6.2 Profil toksisitas	25
3.2.7 Golongan steroid	26
3.2.7.1 <i>Drug-likeness</i> dan profil farmakokinetika	26
3.2.7.2 Profil toksisitas	28
BAB IV KESIMPULAN	30
DAFTAR PUSTAKA	31
LAMPIRAN	36



DAFTAR TABEL

Nomor urut	Halaman
1. 5 senyawa golongan fenolik yang terkandung dalam <i>Caulerpa</i> sp.	5
2. Hasil prediksi drug-likeness 5 senyawa golongan fenolik dari SwissADME	5
3. Hasil prediksi drug-likeness 5 senyawa golongan fenolik dari ADMETLab 2.0	6
4. Hasil prediksi profil farmakokinetika 5 senyawa golongan fenolik dari ADMETLab 2.0	6
5. Hasil prediksi profil farmakokinetika 5 senyawa golongan fenolik dari pkCSM	6
6. Hasil prediksi profil toksisitas 5 senyawa golongan fenolik	6
7. 5 senyawa golongan alkaloid yang terkandung dalam <i>Caulerpa</i> sp.	7
8. Hasil prediksi drug-likeness 5 senyawa golongan alkaloid dari SwissADME	7
9. Hasil prediksi drug-likeness 5 senyawa golongan alkaloid dari ADMETLab 2.0	7
10. Hasil prediksi profil farmakokinetika 5 senyawa golongan alkaloid dari ADMETLab 2.0	8
11. Hasil prediksi profil farmakokinetika 5 senyawa golongan alkaloid dari pkCSM	8
12. Hasil prediksi profil toksisitas 5 senyawa golongan alkaloid	8
13. 5 senyawa golongan terpenoid yang terkandung dalam <i>Caulerpa</i> sp.	8
14. Hasil prediksi drug-likeness 5 senyawa golongan terpenoid dari SwissADME	9
15. Hasil prediksi drug-likeness 5 senyawa golongan terpenoid dari ADMETLab 2.0	9
16. Hasil prediksi profil farmakokinetika 5 senyawa golongan terpenoid dari ADMETLab 2.0	9
17. Hasil prediksi profil farmakokinetika 5 senyawa golongan terpenoid dari pkCSM	10
18. Hasil prediksi profil toksisitas 5 senyawa golongan terpenoid	10



19. 5 senyawa golongan steroid yang terkandung dalam <i>Caulerpa</i> sp.	10
20. Hasil prediksi drug-likeness 5 senyawa golongan steroid dari SwissADME	11
21. Hasil prediksi drug-likeness 5 senyawa golongan steroid dari ADMETLab 2.0	11
22. Hasil prediksi profil farmakokinetika 5 senyawa golongan steroid dari ADMETLab 2.0	11
23. Hasil prediksi profil farmakokinetika 5 senyawa golongan steroid dari pkCSM	11
24. Hasil prediksi profil toksisitas 5 senyawa golongan steroid	12



DAFTAR GAMBAR

Nomor urut	Halaman
1. Ilustrasi <i>BOILED-egg</i> senyawa 3, 5, 6, dan 7	18
2. Ilustrasi <i>BOILED-egg</i> senyawa 2 dan 4	18
3. Toksikofor nongenotoksik senyawa fenolik	19
4. Etil 2-(4-klorofenoksi)-2-metilpropionat	20
5. Ilustrasi <i>BOILED-egg</i> senyawa 11	21
6. Ilustrasi <i>BOILED-egg</i> senyawa caulersin dan 8	21
7. Situs metabolisme CYP2C9, CYP2D6, dan CYP3A4 senyawa caulerpin (a), caulersin (b), racemosin A (c), racemosin B (d), dan racemosin C (e)	22
8. Toksikofor genotoksik senyawa alkaloid	23
9. Ilustrasi <i>BOILED-egg</i> senyawa-senyawa terpenoid yang dapat melintasi BBB	25
10. Toksikofor genotoksik senyawa terpenoid	26
11. Struktur obat afatinib (a), senyawa asam itakonat (b)	27
12. Toksikofor nongenotoksik senyawa terpenoid	27
13. Ilustrasi <i>BOILED-egg</i> senyawa 75 dan 76	28
14. Toksikofor genotoksik steroid	30
15. Struktur obat carfilzomib	30



DAFTAR LAMPIRAN

Nomor Urut	halaman
1. Skema Kerja	37
2. Hasil Penelitian	38
3. Dokumentasi Penelitian	59



BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Caulerpa adalah jenis makroalga hijau dengan banyak spesies yang menghasilkan beragam senyawa bioaktif. Genus *Caulerpa* memiliki 97 spesies dan lebih dari 100 variasi. Dalam situasi stres, alga ini menghasilkan metabolit sekunder, seperti alkaloid bisindol, diterpenoid dan sesquiterpenoid yang memiliki aktivitas biologis seperti insektisida, antimikroba, antiinflamasi, regulasi pertumbuhan tanaman, sitotoksik, antiproliferasi, antidiabetes, dan antimetastatik (Mehra *et al.*, 2019; Yang *et al.*, 2015). Tidak semua senyawa yang ditemukan di dalam *Caulerpa* sp dapat digunakan sebagai obat. Profil farmakokinetika dan toksisitas senyawa harus diteliti secara *in vitro* dan *in vivo* untuk mengetahui potensinya sebagai obat. Namun demikian, pengujian ini memerlukan biaya yang mahal, penggunaan hewan coba, dan kemungkinan kegagalan. Dengan demikian, dapat digunakan metode *in silico* untuk memprediksi profil farmakokinetika dan toksisitas melalui struktur kimia senyawa yang potensial untuk dikembangkan sebagai obat (Moroy *et al.*, 2012; Dong *et al.*, 2018).

Prediksi ADMET (Absorpsi, Distribusi, Metabolisme, Ekskresi, dan Toksisitas) adalah aspek kunci dalam penelitian untuk menemukan obat baru yang aman dan efektif. Memahami bagaimana obat berinteraksi dengan tubuh manusia sebelum uji klinis sangat penting di era kimia molekuler dan desain obat berbasis komputer (Yap, 2011; Ferreira & Andricopulo, 2019). Tercatat bahwa hingga 50% kegagalan uji klinis dikaitkan dengan sifat ADMET yang buruk. Keberhasilan suatu obat tidak hanya bergantung pada efek terapeutik, melainkan juga pada profil ADMET yang dapat mendukung efektivitas dan keamanan obat (DiMasi *et al.*, 2016; Feinberg *et al.*, 2020). Dengan menggabungkan data molekuler dan informasi biologis dengan algoritma pembelajaran mesin yang canggih, penelitian ini dapat memprediksi dengan akurat bagaimana obat-obatan baru akan berperilaku dalam tubuh manusia (Hughes *et al.*, 2008). Prediksi ADMET merupakan tahap awal dan penting bagi pengembangan obat baru karena memungkinkan untuk menyeleksi senyawa-senyawa yang berpotensi obat dengan menggunakan konsep analisis *drug-likeness* atau senyawa 'mirip obat' dan prediksi profil farmakokinetika dan toksisitas.

Drug-likeness melibatkan penilaian berbagai karakteristik fisik dan kimia untuk mengukur potensi sebuah senyawa kimia diserap dan digunakan secara efektif merupakan faktor penting dalam mengevaluasi prospek obat (Lipinski *et al.*, 2001). Kriteria ini dapat membantu membedakan antara zat-zat yang layak untuk penggunaan farmasi dan yang tidak cocok. Berbagai aturan yang didasarkan pada sifat molekul telah dikembangkan, seperti aturan Lipinski, Veber, Egan, dan Muegge. Aturan ini menunjukkan bahwa senyawa yang layak untuk digunakan dalam kisaran tertentu adalah 'mirip obat' (Lipinski *et al.*,



1997; Ghose *et al.*, 1999; Egan *et al.*, 2000; Muegge *et al.*, 2001; Veber *et al.*, 2002; Yalcin, 2020). Penentuan *drug-likeness* senyawa juga dapat dilakukan dengan menggunakan NPscore (*Natural Product likeness score*) yaitu kemiripan senyawa dengan produk alam, aturan Pfizer untuk mengetahui toksisitas senyawa, serta aturan GSK dan *Golden Triangle* yang menunjukkan senyawa dengan profil farmakokinetika yang memuaskan (Chen *et al.*, 2019; Nicolov *et al.*, 2021).

Seiring dengan meningkatnya minat dalam penelitian obat-obatan alam, terutama yang berasal dari sumber laut, penelitian tentang profil ADMET senyawa bioaktif *Caulerpa* sp. menjadi semakin penting. Dengan menggunakan metode *in silico*, prediksi profil ADMET pada senyawa bioaktif *Caulerpa* sp. diperlukan untuk mencegah kegagalan dalam pengembangan obat di masa mendatang.

1.2 Rumusan Masalah

1. Bagaimana memprediksi profil ADMET senyawa-senyawa yang terdapat dalam *Caulerpa* sp. berdasarkan struktur 2 dimensi dari senyawa tersebut?
2. Bagaimana mengidentifikasi senyawa-senyawa potensial yang dapat dikembangkan sebagai obat berdasarkan profil ADMET?

1.3 Tujuan Penelitian

1. Memprediksi profil ADMET senyawa-senyawa yang terdapat dalam *Caulerpa* sp. berdasarkan struktur 2 dimensi dari senyawa tersebut.
2. Mengidentifikasi senyawa-senyawa yang potensial untuk dikembangkan sebagai obat berdasarkan profil ADMET

