

DAFTAR PUSTAKA

- Al-Azzam, K. M. 2023, SwissADME and pkCSM Webservers Predictors: an integrated Online Platform for Accurate and Comprehensive predictions for *In silico* ADME/T Properties of Artemisinin and its Derivatives. *Complex Use of Mineral Resources*. 325(2):14-21, DOI: 10.31643/2023/6445.13
- Awortwe C, Fasinu PS, Rosenkranz B. Application of Caco-2 cell line in herb-drug interaction studies: current approaches and challenges. *J Pharm Pharm Sci*. 2014;17(1):1-19, DOI: 10.18433/j30k63,
- Benigni, R., Bossa, C., Jeliaskova, N., Netzeva, T., & Worth, A. 2008, The Benigni/Bossa Rulebase for Mutagenicity and Carcinogenicity – a Module of Toxtree. *JRC European Communities*.
- Benigni, R., Bossa, C., & Tcheremenskaia, O. 2012, Nongenotoxic Carcinogenicity of chemicals: Mechanisms of Action and early Recognition through a New Set of Structural Alerts. ACS Publications. DOI:10.1021/cr300206t
- Cardoso, F. L., Brites, D. & Brito, M. A. 2010, Looking at The Blood-Brain Barrier: Molecular Anatomy and Possible Investigation Approaches. *Brain Res Rev*. 64(2): 328-363, DOI: 10.1016/j.brainresrev.2010.05.003
- 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, DOI: <https://doi.org/10.47750/>
- Chen, Y., Stork, C., Hirte, S., & Kirchmair, J. (2019). NP-Scout: Machine Learning Approach for the Quantification and Visualization of the Natural Product-Likeness of Small Molecules. *Biomolecules*, 9(2), 43, DOI:10.3390/biom9020043
- Daina, A., & Zoete, V. 2016, A BOILED_Egg to Predict Gastrointestinal Absorption and Brain Penetration of Small Molecules. *ChemMedChem*, 11, 1117 – 1121, DOI: 10.1002/cmdc.201600182
- Daina, A., Michielin, O. & Zoete, V. 2017, SwissADME: a free web tool to evaluate pharmacokinetics, *drug-likeness* and medicinal chemistry friendliness of small molecules. *Sci Rep* 7, 42717, DOI: <https://doi.org/10.1038/srep42717>
- 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, DOI: 10.1016/j.jhealeco.2016.01.012
- Dong, J., Wang, N.-N., Yao, Z.-J., Zhang, L., Cheng, Y., Ouyang, D., ... Cao, D.-S. (2018). ADMETlab: a platform for systematic ADMET evaluation based on a comprehensively collected ADMET database. *Journal of Cheminformatics*, 10(1). DOI:10.1186/s13321-018-0283-x
- K. M., & Baldwin, J. J. (2000). Prediction of Drug Absorption Multivariate Statistics. *Journal of Medicinal Chemistry*, 43(21), 377, DOI:10.1021/jm000292e
- Watanabe, R., Natsume-Kitatani, Y., Kawashima, H., Nagao, H. & Mizuguchi, K. 2019, Constructing an *In silico* Three-Predictor of Human Intestinal Absorption With Caco-2 Solubility and Dried-DMSO Solubility. *J Pharm Sci*. 108(11): 3630-3640, DOI: 10.1016/j.xphs.2019.07.014



- Faulkner, D.J. (1988). Marine Natural Products. *Natural Product Reports*, 5(6), 613-663, DOI: <https://doi.org/10.1039/NP9880500613>
- Faulkner, D.J. (1992). Marine Natural Products. *Natural Product Reports*, 9(4), 323-364, DOI: 10.1039/NP9920900323
- Faulkner, D.J. (1995). Marine Natural Products. *Natural Product Reports*, 12(3), 223-269, DOI: 10.1039/NP9951200223
- Faulkner, D.J. (2000). Highlights of Marine Natural Products Chemistry (1972–1999). *Natural product reports*, 17(1), 1-6, DOI: <https://doi.org/10.1039/A909113K>
- Feinberg, E. N., Joshi, E., Pande, V. S. & Cheng, A. C. 2020, Improvement in ADMET Prediction with Multitask Deep Featurization. *J Med Chem.* 63(16): 8835-8848, DOI: 10.1021/acs.jmedchem.9b02187
- Ferreira, L. L. G., & Andricopulo, A. D. (2019). ADMET modeling approaches in drug discovery. *Drug Discovery Today.* DOI:10.1016/j.drudis.2019.03.015
- 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, DOI: <https://doi.org/10.1002/jps.20536>
- 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, DOI: 10.1021/cc9800071
- Ghafourian, T., Amin, Z. 2013, QSAR Models for The Prediction of Plasma Protein Binding. *Bioimpacts.* 3: 21-27, DOI: 10.5681/bi.2013.011
- Gomes, A. R., Varela, C. L., Tavares-da-Silva, E. J., & Roleira, F. M. F. 2020, Epoxide Containing Molecules: a Good of a Bad Drug Design Approach. *European Journal of Medicinal Chemistry.* 112327, DOI: 10.1016/j.ejmech.2020.112327
- 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, DOI: <https://doi.org/10.1111/j.1365-2885.2008.01034.x>
- Guerriero, A., Meinesz, A., D'Ambrosio, M., & Pietra, F. (1992). Isolation of Toxic and Potentially Toxic Sesqui- and Monoterpenes from the Tropical Green Seaweed *Caulerpa taxifolia* Which Has Invaded the Region of Cap Martin and Monaco. *Helvetica Chimica Acta*, 75(3), 689–695, DOI: 10.1002/hlca.19920750303
- Hall, L. M., Hall, L. H., Kier, L. B. 2003, QSAR Modelling of Beta-lactam Binding to Human Serum Proteins. *J. Comput. Aided Mol. Des.* 17: 103-118, DOI: 10.1023/a:1025309604656
- Hassan, M., Das, H., & Dimmock, J. R. 2019, Recent Advances In A,B-Unsaturated Al Compounds As Mitochondrial Toxins. *European Journal of Medicinal Chemistry.* 183, 111687, DOI: 10.1016/j.ejmech.2019.111687
- Hegde, H. V., Lujiten, M., & Benthem, J. V. 2009, Mechanisms of Mutagenic and Cytotoxic Carcinogens and Importance of a Weight of Evidence Approach. *Mutation Research/Reviews in Mutation Research.* 682(2-3): 109-120, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mrrev.2009.07.002>



- Hughes, J. D., Blagg, J., Price, D. A., Bailey, S., Decrescenzo, G. A., Devraj, R. V., ... & Attwood, R. M. (2008). Physicochemical drug properties associated with *in vivo* toxicological outcomes. *Bioorganic & medicinal chemistry letters*, 18(17), 4872-4875, DOI: 10.1016/j.bmcl.2008.07.071
- Jia, C. Y., Li, J. Y., Hao, G. F., & Yang, G. F. (2020). A Drug-likeness Toolbox Facilitates ADMET Study in Drug Discovery. *Drug Discovery Today*. 25(1): 248-258, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.drudis.2019.10.014>
- Kostal, J. (2016). [Advances in Molecular Toxicology] Volume 10 || Computational Chemistry in Predictive Toxicology. 139–186, DOI:10.1016/B978-0-12-804700-2.00004-0
- Levy, D. D., Zeiger, E., Escobar, P. A., Hakura, A., Leede, B. J. M., Kato, M., Moore, M. M., & Sugiyama, K. 2019, Recommended Criteria for The Evaluation of Bacterial Mutagenicity Data (AMES Test). *Mutation Research/Genetic Toxicology and Environmental Mutagenesis*. DOI: 10.1016/j.mrgentox.2019.07.004
- 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: 1376-1384, DOI: 10.1021/ci050135u
- 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, DOI: 10.1016/s0169-409x(96)00423-1
- Mehra, R., Bushan, S., Bast, F., & Singh, S. (2019). Bioactive metabolites from *Caulerpa* species and their associated pharmaceutical properties. *Journal of Applied Phycology*, 31(5), 2919-2934, DOI: <https://doi.org/10.1007/s11033-019-04743-5>
- Moroy, G., Martiny, V. Y., Vayer, P., Villoutreix, B. O., & Miteva, M. A. (2012). Toward *in silico* structure-based ADMET prediction in drug discovery. *Drug Discovery Today*, 17(1-2), 44–55, DOI: 10.1016/j.drudis.2011.10.023
- Muegge, I., Heald, S. L., & Brittelli, D. (2001). Simple Selection Criteria for Drug-like Chemical Matter. *Journal of Medicinal Chemistry*, 44(12), 1841–1846, DOI: 10.1021/jm015507e
- Nicolov M, Cocora M, Buda V, Danciu C, Duse AO, Watz C, Borcan F. (2021). Hydrosoluble and Liposoluble Vitamins: New Perspectives through ADMET Analysis. *Medicina*. 57(11):1204, DOI: <https://doi.org/10.3390/medicina57111204>,
- 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: 1385-1405, DOI: 10.1124/dmd.10.020479
- P. L. M., Schols, D., Persoons, L., & Zorc, B. (2020). Itaconic acid as potential anticancer agents. *Molecular Diversity*. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11030-020-10147-6>
- Shen L. B., and David B. A. 2015, "PkCSM: Predicting Small-Molecule Pharmacokinetic Properties Using Graph-Based Signatures (How to Interpret PkCSM Result)." [pkCSM: sig.unimelb.edu.au/pkcsm/theory](http://pkcsm.sig.unimelb.edu.au/pkcsm/theory)



- Plosnik, A., Vracko, M. & Dolenc, M. S. 2016, Mutagenic and Carcinogenic Structural Alerts and Their Mechanisms of Action. *Arh Hig Rada Toksikol.* 67: 169-182, DOI: 10.1515/aiht-2016-67-2801
- Protti, I. F., Rodrigues, D. R., Fonseca, S. K., Alves, R. J., B de Oliveira, R. & Maltarollo, V. G. 2021, Do Drug-likeness Rules Apply to Oral Prodrugs?. *ChemMedChem.* 16(9): 1446-1456, DOI: 10.1002/cmdc.202000805
- Radchenko, E. V., Dyabina, A. S., Palyulin, V. A. & Zefirov, N. S. 2016, Prediction of Human Intestinal Absorption of Drug Compounds. *Bulletin of the Academy of Sciences of the USSR Division of Chemical Science.* 65(2):576-580, DOI:10.1007/s11172-016-1340-0
- Resende, F. A., Vilegas, W., Santos, L. C. D., & Varanda, E. A. 2012, Mutagenicity of Flavonoids Assayed by Bacterial Reverse Mutation (AMES) Test. *Molecules.* 17(5): 5255-5268, DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules17055255>
- Rochfort, S.J., Watson, R. dan Capon, R.J. (1996). Dictyosphaerin: a Novel Bicyclic Lipid From a Southern Australian Marine Green Algae, *Dictyosphaeria sericea.* *Journal of Natural Products,* 59(12), 1154-1156, DOI: <https://doi.org/10.1021/np9605347>
- Rydberg, P., Gloriam, D., Zaretski, J., Breneman, C., dan Olsen, L. 2010, SMARTCyp: A 2D Method for Prediction of Cytochrome P450-Mediated Drug Metabolism, *ACS Med. Chem. Lett.*,1 (3), pp 96 100, DOI: 10.1021/ml100016x
- Rydberg, P., Gloriam, D., dan Olsen, L. 2010, The SMARTCyp cytochrome P450 metabolism prediction server, *Bioinformatics,* 26, 2988-2989, DOI: 10.1093/bioinformatics/btq584
- Scheuer, P.J. dan Higa, T. (1987). *Bioorganic Marine Chemistry.* SpringerVerlag.
- Shen, J., Cheng, F., Xu, Y., Li, W. & Tang, Y. 2010, Estimation of ADME Properties with Substructure Pattern Recognition. *J. Chem. Inf. Model.* 50: 1034-1041, DOI: DOI: 10.1021/ci100104j
- Stephens, C., Lucena, M. I., & Andrade, R. J. (2018). Idiosyncratic Drug-Induced Liver Injury: Mechanisms and Susceptibility Factors. *Comprehensive Toxicology,* 625–650, DOI: 10.1016/b978-0-12-801238-3.64089-8,
- Thorn, H. A., Lundhal, A., Schrickx, J. A., Dickinson, P. A., & Lennernas, H. 2011, Drug Metabolism of CYP3A4, CYP2C9, and CYP2D6 substrates in pigs and humans. *European Journal of Pharmaceutical Sciences.* 43(3): 89-98, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ejps.2011.03.008>
- Tringali, C. (1997). Bioactive Metabolites from Marine Algae: Recent Results. *Curr. Org. Chem,* 1(4), 375-394, DOI: 10.2174/1385272801666220126161423
- Ursini, F., & Maiorino, M. 2013, *Encyclopedia of Biological Chemistry.* 2nd Ed. US: Academic Press.
- ...molecular Docking, Drug Likeness, and ADMET Analyses of ...a Compounds as P-Glycoprotein (P-gp) Inhibitor for the ...nt of Cancer. *Current Pharmacology Reports.* DOI: ...s40495-020-00241-6,
- ...hong, Y., Nie, X. & Yu, C. 2013, In-Silico Prediction of Blood- ...rrier Permeability. *SAR QSAR Environ. Res.* 24: 61-74, DOI: ...1062936X.2012.729224

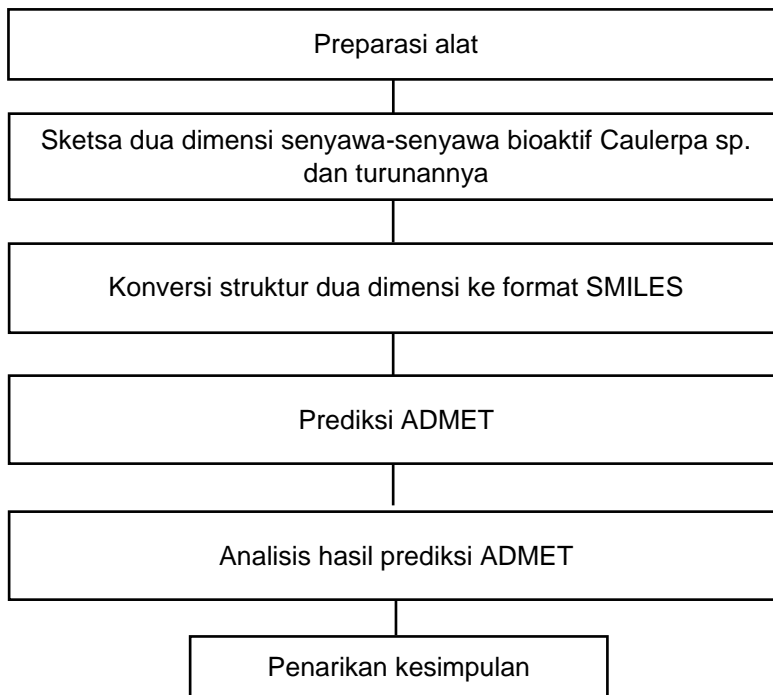


- Yang, P., Liu, D. Q., Liang, T. J., Li, J., Zhang, H.Y., Liu, A.H., Guo, Y.W., & Mao, S.C. (2015). Bioactive Constituents from The Green Alga *Caulerpa racemosin*. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 23, 38-45, DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.bmc.2014.11.031>
- Yap, C. W. (2011). PaDEL-descriptor: An open source software to calculate molecular descriptors and fingerprints. *Journal of Computational Chemistry*, 32(7), 1466-1474, DOI: <https://doi.org/10.1002/jcc.21707>
- 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: 383-395, DOI: 10.1016/j.jmgm.2005.10.004
- Yeni, Y. & Rachmania, R. A. 2022, The Prediction of Pharmacokinetic Properties of Compounds in *Hemigraphis alternata* (Burm.F.) T. Ander Leaves Using pkCSM. *Indones. J. CHem.* 22(4): 1081-1089, DOI: 10.22146/ijc.73117
- 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, DOI: 10.1021/jm020017n.
- Xiong, G., Wu, Z., Yi, J., Fu, L., Yang, Z., Hsieh, C., Yin, M., Zeng, X., Wu, C., Lu, A., Chen, X., Hou, T., & Cao, D. (2021). ADMETLab 2.0: an Integrated Online Platform for Accurate and Comprehensive Predictions of ADMET Properties. *Nucleic Acids Research*, pp. 1-10, DOI: 10.1093/nar/gkab255,
- Zadorozhnyi, P. V., Kiselev, V. V. & Kharchenko, A. V. 2022, *In silico* ADME Profiling of Salubrinal and Its Analogues. *Future Pharmacol.* 2(2): 160-197, DOI: <https://doi.org/10.3390/futurepharmacol2020013>,
- Zayed, A., Babareesh, W. M., Darweesh, R. S., El-Elmat, T., & Hawamdeh, S. S. (2020) Piperine Alters the Pharmacokinetics and Anticoagulation of Warfarin in Rats, *Journal of Experimental Pharmacology*, 12:, 169-179, DOI: 10.2147/JEP.S257919
- 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, DOI: 10.3390/ijms222312808,
- Zhivkova, Z. & Doytchinova, I. 2012, Quantitative Structure-Plasma Protein Binding Relationships of Acidic Drugs. *J. Pharm. Sci.* 101: 4627-4641, DOI: 10.1002/jps.23303
- 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: 1790-1798, DOI: 10.1007/s11095-013-1023-6



LAMPIRAN

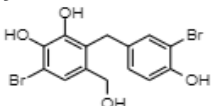
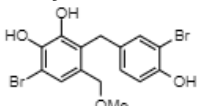
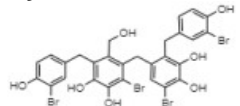
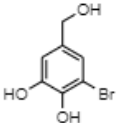
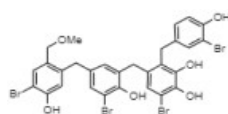
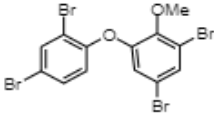
Lampiran 1. Skema Kerja

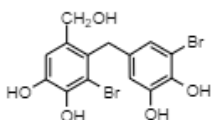


Lampiran 2. Hasil penelitian

2.1 Golongan Fenolik

Tabel 1. Senyawa Golongan Fenolik dan Turunannya yang Terkandung Dalam *Caulerpa* sp.

<p>Senyawa 1</p>  <p>(Scheuer dan Higa, 1987)</p> <p>SMILES: <chem>OCC1=CC(Br)=C(O)C(O)=C1CC1=CC=C(O)C(Br)=C1</chem></p>	<p>Senyawa 2</p>  <p>(Tringali, 1997)</p> <p>SMILES: <chem>BrC(C=C1COC)=C(C(O)=C1)CC2=CC=C(C(Br)=C2)O</chem></p>	<p>Senyawa 3</p>  <p>(Tringali, 1997)</p> <p>SMILES: <chem>OC1=CC=C(CC2=C(O)C(O)=C(Br)C(CC3=CC(Br)=C(O)C(O)=C3CC4=CC=C(O)C(Br)=C4)=C2CO)C=C1Br</chem></p>
<p>Senyawa 4</p>  <p>(Tringali, 1997)</p> <p>SMILES: <chem>OC1=CC(CO)=CC(Br)=C1O</chem></p>	<p>Senyawa 5</p>  <p>(Tringali, 1997)</p> <p>SMILES: <chem>BrC1=CC(COC)=C(CC2=CC(Br)=C(O)C(CC3=C(C(Br)=C(O)C(O)=C3CC4=CC=C(O)C(Br)=C4)=C2)C=C1O</chem></p>	<p>Senyawa 6</p>  <p>(Tringali, 1997)</p> <p>SMILES: <chem>BrC1=C(OC)C(OC2=C(Br)C=C(Br)C=C2)=CC(Br)=C1</chem></p>

Senyawa 7

(Scheuer dan Higa, 1987)

SMILES:
OC1=CC(CO)=C(CC2=C(O)C(O)=C(Br)C=C2)C(Br)=C1



Optimization Software:
www.balesio.com

Analisis *Drug-likeness* Senyawa Golongan Fenolik dari SwissADME.

Aspek	Ghose	Veber	Egan	Muegge
	Ya	Ya	Ya	Ya
	Ya	Ya	Ya	Ya

Senyawa 3	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 4	Ya	Tidak	Ya	Ya	Ya
Senyawa 5	Tidak	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 6	Tidak	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 7	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya

Tabel 3. Hasil Prediksi *Drug-likeness* Senyawa Golongan Fenolik dari ADMETLab 2.0,

Senyawa	NP Score	Lipinski	Pfizer	GSK	<i>Golden Triangle</i>
Senyawa 1	1,13	Ya	Ya	Tidak	Ya
Senyawa 2	0,91	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 3	0,95	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 4	1,21	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 5	0,87	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 6	0,07	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 7	1,34	Ya	Ya	Tidak	Ya

Tabel 4. Hasil Prediksi Profil Farmakokinetika Senyawa Golongan Fenolik dari ADMETLab 2.0.

Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme			Ekskresi
	Caco-2	HIA (%)	Fu (%)	VD	BBB	CYP2C9	CYP2D6	CYP3A4	Total klirens
Senyawa 1	-4,91	>30	0,98	0,38	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	3,30
Senyawa 2	-4,83	>30	1,13	0,47	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	1,98
Senyawa 3	-6,10	<30	0,64	0,48	Tidak	Tidak	Tidak	Ya	2,37
Senyawa 4	-4,55	>30	25,4	0,56	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	9,83
Senyawa 5	-6,05	<30	0,99	0,57	Tidak	Tidak	Tidak	Ya	1,40
Senyawa 6	-4,97	<30	5,11	2,53	Ya	Ya	Ya	Tidak	0,96
Senyawa 7	-5,27	>30	1,03	0,40	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	5,65

Tabel 5. Hasil Prediksi Profil Farmakokinetika Senyawa Golongan Fenolik dari pkCSM.

Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme		Ekskresi	
	Caco-2	HIA (%)	Fu (%)	VD	BBB	CYP2D6	CYP3A4	Total klirens	OCT2 Substrat
Senyawa 1	0,86	90,26	0,12	0,19	-1,16	Tidak	Tidak	-0,18	Tidak
	9,96	0,14	0,27	-1,11	Tidak	Tidak	-0,10	Tidak	
	7,03	0,31	-0,59	-2,21	Tidak	Ya	-0,80	Tidak	
	0,27	0,56	0,05	-0,39	Tidak	Tidak	0,07	Tidak	
	3,19	0,29	-0,99	-1,87	Tidak	Ya	-0,80	Tidak	
	1,68	0,01	0,29	0,24	Tidak	Ya	-0,13	Tidak	
	4,30	0,13	0,24	-1,29	Tidak	Tidak	-0,34	Tidak	

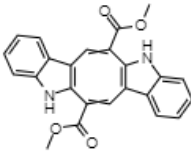
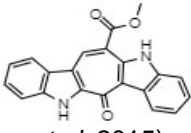
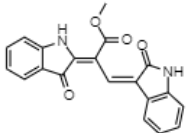
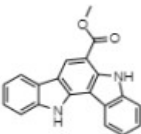
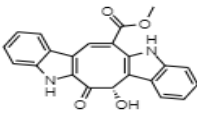
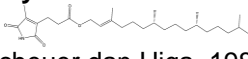
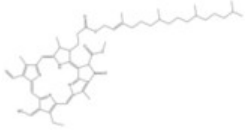
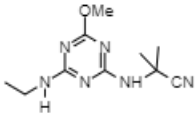


Tabel 6, Hasil Prediksi Profil Toksisitas Senyawa Golongan Fenolik dari.

Senyawa	Toksisitas		
	Tes Ames	Genotoksik	Non-genotoksik
Senyawa 1	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 2	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 3	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 4	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 5	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 6	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 7	Tidak	Tidak	Ya

2,2 Golongan Alkaloid

Tabel 7, Senyawa Golongan Alkaloid dan Turunannya yang Terkandung Dalam *Caulerpa* sp.

Caulerpin	Caulersin	Racemosin A
 <p>(Yang <i>et al.</i> 2015)</p> <p>SMILES: <chem>COC(=O)C1=CC2=C(C(=CC3=C1NC4=CC=CC=C43)C(=O)OC)NC5=C C=CC=C52</chem></p>	 <p>(Yang <i>et al.</i> 2015)</p> <p>SMILES: <chem>O=C1C2=C(C3=CC=CC=C3N2[H])C=C(C(OC)=O)C4=C1C5=CC=CC=C5N4[H]</chem></p>	 <p>(Yang <i>et al.</i> 2015)</p> <p>SMILES: <chem>O=C(C1=CC=CC=C1N/2)C2=C(C(OC)=O)/C=C3C4=C(NC/3=O)C=CC=C4</chem></p>
Racemosin B	Racemosin C	Senyawa 8
 <p>(Yang <i>et al.</i> 2015)</p> <p>SMILES: <chem>O=C(OC)C1=CC2=C(C3=C1NC4=C3C=CC=C4)NC5=CC=CC=C52</chem></p>	 <p>(Yang <i>et al.</i> 2015)</p> <p>SMILES: <chem>O=C1C2=C(C3=CC=CC=C3N2)/C=C(C(OC)=O)\C4=C(C(C=CC=C5)=C5N4)[C@@H]1O</chem></p>	 <p>(Scheuer dan Higa, 1987)</p> <p>SMILES: <chem>CCC/CC=C/COC(CCC1=CCC(NC1=O)=O)=O</chem></p>
Senyawa 10	Senyawa 11	
 <p>(Scheuer dan Higa, 1987)</p>	 <p>(Faulkner, 2000)</p>	



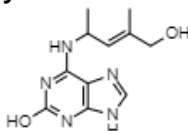
SMILES:

CCC1=C(C2=NC1=CC3=C(C4=C(C(C(=C5C(C(C=CC6=NC(=C2)C=C6C)C=C)N5)C)CCC(=O)OCC=CCCCCCCCCCC)C4=N3)C(=O)OC)O)C

SMILES:

CCC1=C2C=C3C(=C4C(=O)C(C(=C5C(C(C=C6=NC(=CC(=N2)C1=C)O)C(=C6C)C=C)N5)C)C(=O)OCC=CCCCCCC)C4=N3)C(=O)OC

SMILES:

CCN(C1=NC(NCCCC#N)=NC(OC)=N1)[H]
Senyawa 12

(Faulkner, 1995)

SMILES:

CC(/C=CC/CO)NC1=N
C(O)=NC2=C1N=CN2
Tabel 8. Hasil Prediksi *Drug-likeness* Senyawa Golongan Alkaloid dari SwissADME.

Senyawa	Lipinski	Ghose	Veber	Egan	Muegge
Caulerpin	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Caulersin	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Racemosin A	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Racemosin B	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Racemosin C	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 8	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 9	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 10	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 11	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 12	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya

Tabel 9. Hasil Prediksi *Drug-likeness* Senyawa Golongan Alkaloid dari ADMETLab 2.0.

Senyawa	NP Score	Lipinski	Pfizer	GSK	Golden Triangle
Caulerpin	0,48	Ya	Ya	Tidak	Ya
Caulersin	0.20	Ya	Tidak	Tidak	Ya
14		Ya	Ya	Ya	Ya
19		Ya	Tidak	Tidak	Ya
73		Ya	Ya	Ya	Ya
15		Ya	Ya	Ya	Ya
87		Tidak	Ya	Tidak	Tidak
88		Tidak	Ya	Tidak	Tidak
13		Ya	Ya	Ya	Ya



Optimization Software:
www.balesio.com

Senyawa 12	0,59	Ya	Ya	Ya	Ya
------------	------	----	----	----	----

Tabel 10. Hasil Prediksi Profil Farmakokinetika Senyawa Golongan Alkaloid dari ADMETLab 2.0.

Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme			Ekskresi
	Caco-2	HIA (%)	Fu (%)	VD	BBB	CYP 2C9	CYP 2D6	CYP 3A4	Total klirens
Caulerpin	-6,01	>30	1,06	0,06	Tidak	Ya	Ya	Ya	3,87
Caulersin	-5,26	>30	4,12	0,51	Ya	Ya	Ya	Ya	2,84
Racemosin A	-5,04	>30	1,22	0,42	Tidak	Ya	Tidak	Ya	1,09
Racemosin B	-5,29	>30	2,83	0,41	Ya	Ya	Ya	Tidak	3,77
Racemosin C	-5,38	>30	1,72	0,26	Ya	Ya	Ya	Ya	4,56
Senyawa 8	-4,64	>30	10,28	0,51	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	6,71
Senyawa 9	-5,33	>30	1,05	5,31	Tidak	Tidak	Tidak	Ya	0,45
Senyawa 10	-5,28	>30	0,73	4,01	Tidak	Tidak	Tidak	Ya	0,44
Senyawa 11	-4,91	<30	24,01	1,36	Tidak	Tidak	Ya	Tidak	8,73
Senyawa 12	-5,43	>30	21,13	0,69	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	9,47

Tabel 11. Hasil Prediksi Profil Farmakokinetika Senyawa Golongan Alkaloid dari pkCSM.

Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme		Ekskresi	
	Caco-2	HIA (%)	Fu (%)	VD	BBB	CYP 2D6	CYP 3A4	Total klirens	OCT 2 Substrat
Caulerpin	0,97	96,25	0,03	-0,36	0,17	Tidak	Ya	0,80	Tidak
Caulersin	0,66	96,28	0,08	-0,63	-0,03	Tidak	Ya	0,76	Tidak
Racemosin A	1,12	93,93	0,03	0,06	-0,04	Tidak	Ya	0,13	Tidak
Racemosin B	1,24	96,6	0,06	-1,17	0,04	Tidak	Ya	0,93	Tidak
Racemosin C	0,15	95,5	0,02	0,16	-0,94	Tidak	Ya	0,43	Tidak
Senyawa 8	0,96	94	0,39	-0,19	-0,43	Tidak	Tidak	1,62	Tidak
Senyawa 9	0,58	100	0	-1,03	-1,07	Tidak	Ya	-0,05	Tidak
Senyawa 10	0,13	100	0	-1,05	-1,33	Tidak	Ya	-0,07	Tidak
Senyawa 11	-0,23	75	0,68	-0,42	-0,71	Tidak	Tidak	0,50	Tidak
Senyawa 12	-0,25	55,18	0,54	-0,17	-1,38	Tidak	Tidak	0,78	Tidak

Tabel 12. Hasil Prediksi Profil Toksisitas Senyawa Golongan Alkaloid.

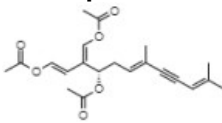
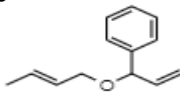
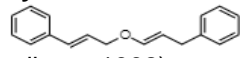
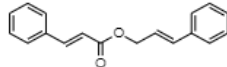
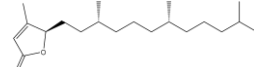
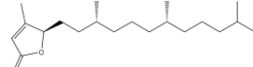
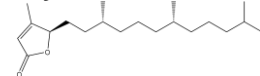
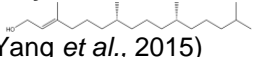
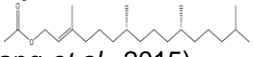

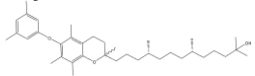
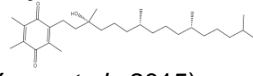
	Toksisitas		
	Tes Ames	Genotoksik	Non-genotoksik
	Tidak	Ya	Ya
	Ya	Ya	Ya
	Tidak	Ya	Tidak
	Ya	Ya	Ya
	Tidak	Ya	Ya

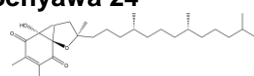
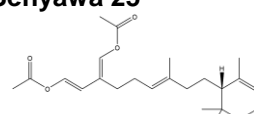
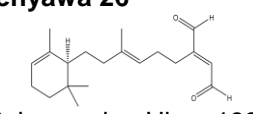
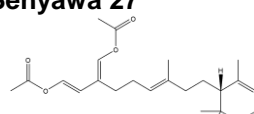
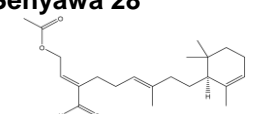
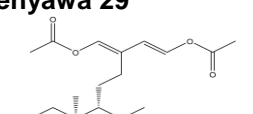
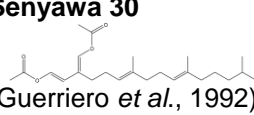
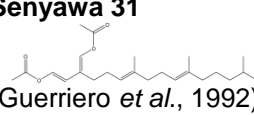
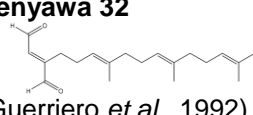
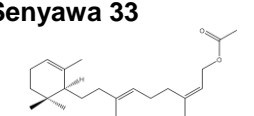
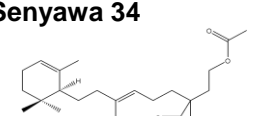
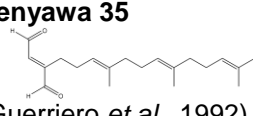


Senyawa 8	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 9	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 10	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 11	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 12	Tidak	Ya	Tidak

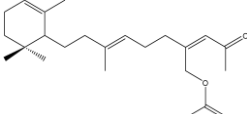
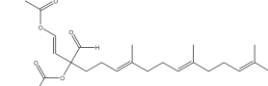
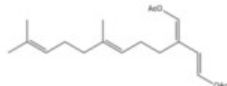
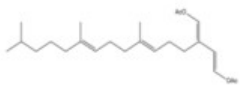
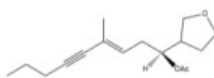
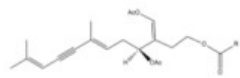
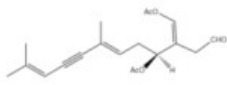
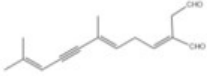
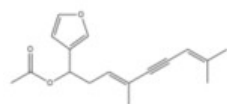
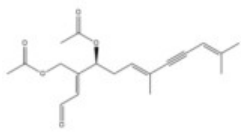
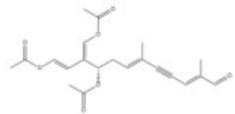
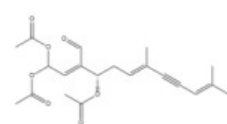
2.3 Golongan Terpenoid

Tabel 13. Senyawa Golongan Terpenoid dan Turunannya yang Terkandung Dalam *Caulerpa* sp.

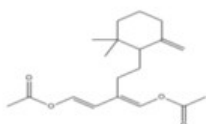
<p>Caulerpenin</p>  <p>(Yang <i>et al.</i> 2015)</p> <p>SMILES: <chem>CC(=CC#C/C(=C/C[C@H](/C(=C\OC(=O)C)/C=C/OC(=O)C)OC(=O)C)/C</chem></p>	<p>Senyawa 13</p>  <p>(Faulkner, 1992)</p> <p>SMILES: <chem>C\C=C\COC(C=C)C1=C C=CC=C1</chem></p>	<p>Senyawa 14</p>  <p>(Faulkner, 1992)</p> <p>SMILES: <chem>C(O\C=C\CC1=CC=CC=C1)\C=C\C1=CC=CC=C1</chem></p>
<p>Senyawa 15</p>  <p>(Faulkner, 1992)</p> <p>SMILES: <chem>O=C(OC\C=C\C1=CC=CC=C1)\C=C\C1=CC=CC=C1</chem></p>	<p>Senyawa 16</p>  <p>(Yang <i>et al.</i>, 2015)</p> <p>SMILES: <chem>O=C1C=CC[C@@H](C C[C@@H]CCCC[C@@H]C CCCCC)O1</chem></p>	<p>Senyawa 17</p>  <p>(Yang <i>et al.</i>, 2015)</p> <p>SMILES: <chem>O=C1C=CC[C@H](CC[C@H]CCCC[C@H]CCCC CC)O1</chem></p>
<p>Senyawa 18</p>  <p>(Yang <i>et al.</i>, 2015)</p> <p>SMILES: <chem>C[C@H](CCC[C@H]CC CCCCC)CCCC1=CC(O C1O)=O</chem></p>	<p>Senyawa 19</p>  <p>(Yang <i>et al.</i>, 2015)</p> <p>SMILES: <chem>OC/C=CC/CCC[C@H]C CCC[C@H]CCCCCCC</chem></p>	<p>Senyawa 20</p>  <p>(Yang <i>et al.</i>, 2015)</p> <p>SMILES: <chem>CC(OC/C=CC/CCC[C@H] CCCC[C@H]CCCCCCC) =O</chem></p>
<p>Senyawa 21</p>  <p>Optimization Software: www.balesio.com</p>	<p>Senyawa 22</p>  <p>(Yang <i>et al.</i>, 2015)</p> <p>SMILES: <chem>CC1=CC(OC2=CCCC= C(OC(CCC[C@H]CCC</chem></p>	<p>Senyawa 23</p>  <p>(Yang <i>et al.</i>, 2015)</p> <p>SMILES: <chem>CC1=CCC(CC=C(CC[C@H]C(O)CCC[C@H]CCCC</chem></p>

<chem>CCCC)CCC[C@@]1C CCC2([C@](O)(CC=O) CC=CCC2=O)O1</chem>	<chem>C[C@H]CCCCCCCC)C CC3)C3=C2C)=CCC=C 1</chem>	<chem>[C@H]CCCCCCCC)C1=O) =O</chem>
<p>Senyawa 24</p>  <p>(Yang <i>et al.</i>, 2015)</p> <p>SMILES: <chem>C[C@H](CCC[C@H]CC CCCC)CCC[C@]1CC C([C@]2(O)C(CC=CCC 3=O)=O)[C@@]23O1</chem></p>	<p>Senyawa 25</p>  <p>(Scheuer dan Higa, 1987)</p> <p>SMILES: <chem>[C@@H]1(CCCC=CCC\ C(=C/OCC=O)C=COCC =O)C(=CCCC1CC)C</chem></p>	<p>Senyawa 26</p>  <p>(Scheuer dan Higa, 1987)</p> <p>SMILES: <chem>C([H])(=O)C=C(CCC=CC CC[C@@H]1C(=CCCC1 CC)C)C([H])=O</chem></p>
<p>Senyawa 27</p>  <p>(Scheuer dan Higa, 1987)</p> <p>SMILES: <chem>[C@@H]1(CCCC=CCC C(COCC=O)=CCOCC= O)C(=CCCC1CC)C</chem></p>	<p>Senyawa 28</p>  <p>(Scheuer dan Higa, 1987)</p> <p>SMILES: <chem>C([H])(=O)C(CCC=CCC C[C@@H]1C(=CCCC1 CC)C)=CCOCC=O</chem></p>	<p>Senyawa 29</p>  <p>(Scheuer dan Higa, 1987)</p> <p>SMILES: <chem>CC(=O)O\C=C\C\ [C@@H]1CC=CCC2CCCC CC[C@@]12C=C\OCC= O</chem></p>
<p>Senyawa 30</p>  <p>(Guerriero <i>et al.</i>, 1992)</p> <p>SMILES: <chem>CCCCC\C=C\C\ =C\C\C(=C/OCC=O)\C =C\OCC=O</chem></p>	<p>Senyawa 31</p>  <p>(Guerriero <i>et al.</i>, 1992)</p> <p>SMILES: <chem>CCC=CCCC=CCCC =CCC\C(=C/OCC=O)C= COCC=O</chem></p>	<p>Senyawa 32</p>  <p>(Guerriero <i>et al.</i>, 1992)</p> <p>SMILES: <chem>C([H])(=O)C=C(CCC=CC CCC=CCCC=CCC)C([H])=O</chem></p>
<p>Senyawa 33</p>  <p>(Scheuer dan Higa, 1987)</p> <p>SMILES: <chem>C([H])(=O)C(CCC=CCC C[C@@H]1C(=CCCC1 CC)C)(COCC=O)C=CO</chem></p>	<p>Senyawa 34</p>  <p>(Scheuer dan Higa, 1987)</p> <p>SMILES: <chem>C([H])(=O)C(CCC=CCC C[C@@H]1C(=CCCC1 CC)C)(COCC=O)C=CO</chem></p>	<p>Senyawa 35</p>  <p>(Guerriero <i>et al.</i>, 1992)</p> <p>SMILES: <chem>C([H])(=O)C=C(CCC=CC CCC=CCCC=CCC)CO CC=O</chem></p>



	CC=O	
<p>Senyawa 36</p>  <p>(Scheuer dan Higa, 1987)</p> <p>SMILES: C([H])(C=C(COCC=O)C CC=C(CC[C@@H]1C(=CCCC1CC)C)C)=O</p>	<p>Senyawa 37</p>  <p>(Guerriero <i>et al.</i>, 1992)</p> <p>SMILES: C([H])(=O)C(CCC=CCC CC=CCCCC=CCC)(OC C=O)C=COCC=O</p>	<p>Senyawa 38</p>  <p>(Scheuer dan Higa, 1987)</p> <p>SMILES: CCC=CCCC=CCC\C(C =COCC=O)=C/OCC=O</p>
<p>Senyawa 39</p>  <p>(Scheuer dan Higa, 1987)</p> <p>SMILES: C/C(CCCCC)=C\CC/C C=C/CCC(/C=C/OCC= O)=C\OCC=O</p>	<p>Senyawa 40</p>  <p>(Guerriero <i>et al.</i>, 1992)</p> <p>SMILES: [C@H](OCC=O)(C1CC OC1)CC=C(C#CCCC)C</p>	<p>Senyawa 41</p>  <p>(Guerriero <i>et al.</i>, 1992)</p> <p>SMILES: CC(OCC\C([C@@H](CC =C(C#CC=CCC)C)OCC= O)=C\OCC=O)=O</p>
<p>Senyawa 42</p>  <p>(Guerriero <i>et al.</i>, 1992)</p> <p>SMILES: [H][C@](C/C=C(C#C/C= CC\C)C)(OCC=O)/C(C C([H])=O)=C\OCC=O</p>	<p>Senyawa 43</p>  <p>(Guerriero <i>et al.</i>, 1992)</p> <p>SMILES: CC(C#CC=CCC)=CCC =C(CC([H])=O)C([H])=O</p>	<p>Senyawa 44</p>  <p>(Guerriero <i>et al.</i>, 1992)</p> <p>SMILES: CC(=CC#CC(=CCC(C1= COC=C1)OC(=O)C)C)C</p>
<p>Senyawa 45</p>  <p>(Guerriero <i>et al.</i>, 1992)</p> <p>SMILES: C/C(=C\C([C@@H](/C(= C\OC(=O)C)/C=C/OC(= O)C)OC(=O)C)/C#C/C= C\C)/C=O</p>	<p>Senyawa 46</p>  <p>(Guerriero <i>et al.</i>, 1992)</p> <p>SMILES: C/C(=C\C([C@@H](/C(= C\OC(=O)C)/C=C/OC(= O)C)OC(=O)C)/C#C/C= C\C)/C=O</p>	<p>Senyawa 47</p>  <p>(Guerriero <i>et al.</i>, 1992)</p> <p>SMILES: CC(=CC#CC(=CC[C@@ H](C(=CC(OC(=O)C)OC(=O)C)C=O)OC(=O)C)C)C</p>
	Senyawa 49	Senyawa 50

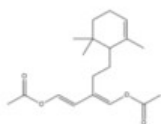




(Scheuer dan Higa, 1987)

SMILES:
C1C(C(C(CC1)CC)CC)\C(=C/OCC=O)C=COCC=O)=C

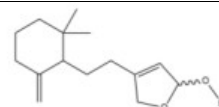
Senyawa 51



(Scheuer dan Higa, 1987)

SMILES:
C1=C(C(C(CC1)CC)CC)\C(=C/OCC=O)C=COCC=O)C

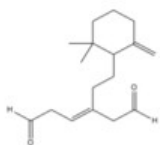
Senyawa 52



(Scheuer dan Higa, 1987)

SMILES:
CC1(C)C(CCC2=CC(O)OC2)C(CCC1)=C

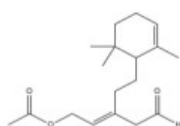
Senyawa 53



(Scheuer dan Higa, 1987)

SMILES:
C1C(C(C(CC1)(C)C)CC)C(CC(=O)[H])=CCC(=O)[H]=C

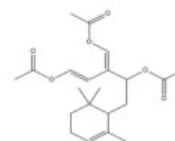
Senyawa 54



(Scheuer dan Higa, 1987)

SMILES:
C1=C(C(C(CC1)CC)CC)C(CC(=O)[H])=CCOCC=O)C

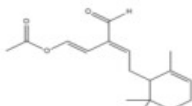
Senyawa 55



(Scheuer dan Higa, 1987)

SMILES:
C1=C(C(C(CC1)CC)CC)\C(=C\OCC=O)C=COCC=O)OCC=O)C

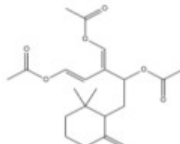
Senyawa 56



(Scheuer dan Higa, 1987)

SMILES:
[H]C(=O)\C(=C\CC1CC=CCCC1CC)\C=C\OCC=O

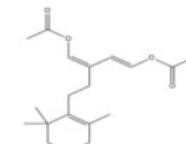
Senyawa 57



(Scheuer dan Higa, 1987)

SMILES:
C1CCC(C(C1=C)CC)\C(=C\OCC=O)C=COCC=O)OCC=O)CC

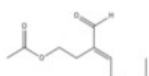
Senyawa 58



(Scheuer dan Higa, 1987)

SMILES:
C1CCC(C(=C1C)CC)\C(=C\OCC=O)C=COCC=O)C

Senyawa 59



Higa,

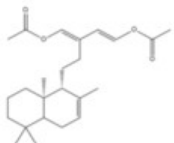


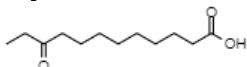
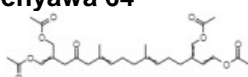
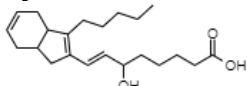
(Scheuer dan Higa, 1987)

SMILES:
[H]C(=O)C(\CCOCC=O)=C\CC1C(=C)CCCC1C

(Scheuer dan Higa, 1987)

SMILES:
CC(=O)OC=C\C(CCCCC=CCC1CCCCC[C@]1CO)=C\OCC=O



<chem>=C\CC1CC=CCCC1CC</chem>	C		
Senyawa 60  (Scheuer dan Higa, 1987) SMILES: <chem>CC(=O)O\C=C\C(\CC[C@@H]1CC=CCC2CCC[C@@]12C)=C\OCC=O</chem>	Senyawa 61  (Scheuer dan Higa, 1987) SMILES: <chem>CCC=CCCC=CCCC=CCCC=CCCC=CCC[C@H](O)CC=C</chem>	Senyawa 62  (Scheuer dan Higa, 1987) SMILES: <chem>CC(=CCCC(=CCCC(=CC1C(O1)CCCC=CCCC=C(C)C)C)C</chem>	
Senyawa 63  (Scheuer dan Higa, 1987) SMILES: <chem>CCC(CCCCCCCC(O)=O)=O</chem>	Senyawa 64  (Scheuer dan Higa, 1987) SMILES: <chem>CC(=CCCC(=COC(=O)C)C=COC(=O)C)CCC=CCCC(=O)CC(=COC(=O)C)COC(=O)C</chem>	Senyawa 65  (Rochfort <i>et al.</i> , 1996) SMILES: <chem>CCCCC1=C(/C=C/C(O)CCCC(O)=O)CC2C1CC=CC2</chem>	


Tabel 14. Hasil Prediksi *Drug-likeness* Senyawa Golongan Terpenoid dari SwissADME.

Senyawa	Lipinski	Ghose	Veber	Egan	Muegge
Caulerpenin	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 13	Ya	Ya	Ya	Ya	Tidak
Senyawa 14	Ya	Ya	Ya	Ya	Tidak
Senyawa 15	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 16	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 17	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 18	Ya	Ya	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 19	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 20	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak



Senyawa 28	Ya	Ya	Ya	Ya	Tidak
Senyawa 29	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 30	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 31	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 32	Ya	Ya	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 33	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 34	Ya	Tidak	Tidak	Ya	Ya
Senyawa 35	Ya	Tidak	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 36	Ya	Ya	Ya	Ya	Tidak
Senyawa 37	Ya	Tidak	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 38	Ya	Ya	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 39	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 40	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 41	Ya	Ya	Tidak	Ya	Ya
Senyawa 42	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 43	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 44	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 45	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 46	Ya	Ya	Tidak	Ya	Ya
Senyawa 47	Ya	Ya	Tidak	Ya	Ya
Senyawa 48	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 49	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 50	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 51	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 52	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 53	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 54	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 55	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 56	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 57	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 58	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 59	Ya	Ya	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 60	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 61	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 62	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 63	Ya	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 64	Ya	Tidak	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 65	Ya	Ya	Tidak	Ya	Ya

Tabel 15. Hasil Prediksi *Drug-likeness* Senyawa Golongan Terpenoid dari

 Optimization Software: www.balesio.com	core	Lipinski	Pfizer	GSK	<i>Golden Triangle</i>
	39	Ya	Ya	Ya	Ya
	01	Ya	Ya	Ya	Tidak
	64	Ya	Tidak	Ya	Ya
	66	Ya	Tidak	Ya	Ya
	68	Ya	Tidak	Tidak	Tidak

Senyawa 17	1,58	Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 18	1,89	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 19	1,53	Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 20	1,41	Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 21	1,53	Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 22	0,86	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 23	1,11	Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 24	1,31	Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 25	2,43	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 26	3,01	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 27	2,55	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 28	2,84	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 29	2,36	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 30	1,56	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 31	1,53	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 32	1,87	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 33	2,55	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 34	2,29	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 35	1,74	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 36	2,74	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 37	1,57	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 38	1,86	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 39	1,57	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 40	1,36	Ya	Tidak	Ya	Ya
Senyawa 41	1,31	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 42	1,61	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 43	1,83	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 44	1,78	Ya	Tidak	Ya	Ya
Senyawa 45	1,44	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 46	1,52	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 47	1,26	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 48	2,18	Ya	Tidak	Ya	Ya
Senyawa 49	2,11	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 50	2,86	Ya	Tidak	Ya	Ya
Senyawa 51	2,82	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 52	2,65	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 53	1,99	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 54	3,01	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 55	2,10	Ya	Ya	Ya	Ya
Senyawa 56	1,77	Ya	Tidak	Tidak	Ya
	1,63	Ya	Tidak	Ya	Ya
	1,68	Ya	Tidak	Ya	Ya
	1,77	Ya	Tidak	Tidak	Ya
	1,66	Ya	Tidak	Tidak	Ya
	1,72	Ya	Tidak	Tidak	Tidak
	1,69	Ya	Tidak	Tidak	Tidak
	1,66	Ya	Ya	Ya	Ya



Senyawa 64	1,60	Ya	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 65	1,49	Ya	Tidak	Tidak	Ya

Tabel 16. Hasil Prediksi Profil Farmakokinetika Senyawa Golongan Terpenoid dari ADMETLab 2.0.

Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme			Ekskr esi
	Caco -2	HIA (%)	Fu (%)	VD	BBB	CYP 2C9	CYP 2D6	CYP 3A4	Total kliren s
Caulerpenin	-4,76	>30	18,22	1,54	Ya	Ya	Ya	Ya	3,01
Senyawa 13	-4,28	>30	2,23	0,85	Tidak	Ya	Ya	Tidak	3,63
Senyawa 14	-4,69	>30	2,14	0,60	Ya	Ya	Ya	Tidak	5,57
Senyawa 15	-4,76	>30	2,09	0,54	Ya	Ya	Ya	Tidak	6,94
Senyawa 16	-4,62	>30	2,47	1,62	Ya	Ya	Tidak	Tidak	2,82
Senyawa 17	-4,62	>30	2,80	1,46	Tidak	Ya	Tidak	Tidak	4,35
Senyawa 18	-4,71	>30	2,443	1,41	Tidak	Ya	Tidak	Tidak	2,87
Senyawa 19	-4,51	>30	2,23	2,29	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	5,65
Senyawa 20	-4,71	>30	2,55	1,56	Ya	Ya	Tidak	Tidak	4,04
Senyawa 21	-4,78	>30	2,19	1,30	Ya	Tidak	Tidak	Ya	8,30
Senyawa 22	-5,77	>30	2,99	5,98	Ya	Ya	Ya	Tidak	7,50
Senyawa 23	-4,75	>30	1,85	2,09	Tidak	Ya	Tidak	Tidak	4,73
Senyawa 24	-4,81	>30	3,07	1,87	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	6,21
Senyawa 25	-4,83	>30	9,55	1,20	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	2,57
Senyawa 26	-4,54	>30	3,74	2,86	Tidak	Ya	Ya	Tidak	2,18
Senyawa 27	-4,53	>30	3,92	2,32	Tidak	Ya	Ya	Tidak	3,98
Senyawa 28	-4,55	>30	3,69	2,04	Tidak	Ya	Ya	Tidak	3,28
Senyawa 29	-4,69	>30	15,75	1,02	Ya	Ya	Tidak	Tidak	2,21
Senyawa 30	-4,78	>30	13,33	0,88	Ya	Ya	Tidak	Tidak	2,47
Senyawa 31	-4,84	>30	16,06	0,96	Ya	Ya	Tidak	Tidak	2,48
Senyawa 32	-4,57	>30	5,18	4,62	Tidak	Ya	Tidak	Tidak	2,58
Senyawa 33	-4,53	>30	3,92	2,32	Tidak	Ya	Tidak	Tidak	3,98
Senyawa 34	-4,73	>30	17,15	1,68	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	3,16
Senyawa 35	-4,57	>30	4,64	5,56	Ya	Ya	Tidak	Tidak	2,09
Senyawa 36	-4,54	>30	3,97	3,14	Ya	Ya	Tidak	Tidak	1,66
Senyawa 37	-4,70	>30	10,16	2,26	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	5,48
Senyawa 38	-4,81	>30	11,34	1,32	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	4,17
Senyawa 39	-4,78	>30	13,33	0,88	Ya	Ya	Tidak	Tidak	2,47
Senyawa 40	-4,37	>30	4,12	1,73	Ya	Ya	Ya	Tidak	5,72
Senyawa 41	-4,55	>30	15,85	1,69	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	2,95
Senyawa 42	-4,52	>30	16,55	1,66	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	3,28
Senyawa 43	-4,52	>30	9,07	1,73	Ya	Ya	Ya	Tidak	4,74
Senyawa 44	-4,52	>30	2,29	3,69	Ya	Ya	Ya	Ya	7,63
Senyawa 45	-4,52	>30	16,03	2,35	Ya	Tidak	Ya	Tidak	2,74
Senyawa 46	-4,52	>30	17,56	1,39	Tidak	Tidak	Tidak	Tidak	1,93
Senyawa 47	-4,52	>30	24,94	2,46	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	2,60
Senyawa 48	-4,52	>30	40,23	0,74	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	2,37
Senyawa 49	-4,52	>30	24,74	1,02	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	2,45



Senyawa 50	-4,58	>30	16,28	1,47	Ya	Ya	Ya	Tidak	5,26
Senyawa 51	-4,54	>30	20,65	1,21	Tidak	Ya	Ya	Tidak	5,01
Senyawa 52	-4,49	>30	23,64	1,91	Ya	Ya	Tidak	Tidak	5,76
Senyawa 53	-4,83	>30	33,76	1,01	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	2,36
Senyawa 54	-4,54	>30	21,30	1,66	Ya	Ya	Ya	Tidak	2,31
Senyawa 55	-4,82	>30	44,51	0,81	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	2,34
Senyawa 56	-4,77	>30	12,32	1,35	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	2,75
Senyawa 57	-4,52	>30	12,66	1,54	Ya	Ya	Ya	Tidak	4,88
Senyawa 58	-4,56	>30	35,09	1,11	Ya	Ya	Ya	Tidak	3,80
Senyawa 59	-4,74	>30	30,37	0,78	Ya	Ya	Tidak	Tidak	2,72
Senyawa 60	-4,69	>30	15,76	1,02	Ya	Ya	Tidak	Tidak	2,21
Senyawa 61	-4,70	>30	5,11	8,11	Tidak	Ya	Tidak	Tidak	11,85
Senyawa 62	-4,68	>30	4,63	8,91	Tidak	Ya	Tidak	Tidak	18,74
Senyawa 63	-4,92	>30	9,45	0,29	Ya	Ya	Tidak	Tidak	4,65
Senyawa 64	-4,89	>30	25,49	1,25	Ya	Tidak	Tidak	Tidak	1,88
Senyawa 65	-4,81	>30	0,91	0,48	Tidak	Ya	Ya	Tidak	3,83

Tabel 17. Hasil Prediksi Profil Farmakokinetika Senyawa Golongan Terpenoid dari pkCSM.


Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme		Ekskresi	
	Cac o-2	HIA (%)	Fu (%)	VD	BBB	CYP 2D6	CYP 3A4	Total klirens	OCT2 Substrat
Caulerpenin	1,28	96,52	0,22	-0,35	-0,68	Tidak	Tidak	1,83	Ya
Senyawa 13	1,63	95,53	0,20	0,47	0,68	Tidak	Tidak	0,37	Tidak
Senyawa 14	1,56	94,82	0	0,57	0,78	Tidak	Ya	0,26	Tidak
Senyawa 15	1,68	95,47	0	0,27	0,39	Tidak	Ya	0,77	Tidak
Senyawa 16	1,64	94,9	0	0,41	0,72	Tidak	Ya	1,43	Tidak
Senyawa 17	1,65	94,9	0	0,41	0,72	Tidak	Ya	1,43	Tidak
Senyawa 18	1,51	91,61	0,06	0,12	0,16	Tidak	Ya	1,44	Tidak
Senyawa 19	1,52	91,9	0	0,47	0,81	Tidak	Ya	1,68	Tidak
Senyawa 20	1,20	94,25	0	0,30	0,75	Tidak	Ya	1,68	Tidak
Senyawa 21	0,62	91,4	0	0,03	-0,04	Tidak	Ya	0,94	Tidak
Senyawa 22	1,48	94,11	0	0,62	0,98	Tidak	Ya	0,26	Tidak
Senyawa 23	1,16	93,16	0	-0,11	-0,58	Tidak	Ya	1,15	Tidak
Senyawa 24	0,60	92,69	0	0,12	0,48	Tidak	Ya	0,73	Tidak
Senyawa 25	1,14	93,91	0,03	0,11	0,11	Tidak	Ya	1,46	Ya
Senyawa 26	1,37	95,81	0,08	0,26	0,18	Tidak	Ya	1,58	Ya
Senyawa 27	1,13	95	0,05	0,11	0,07	Tidak	Ya	1,48	Ya
		96	0,06	0,16	0,08	Tidak	Ya	1,53	Ya
		95,71	0	0,07	-0,07	Tidak	Ya	0,86	Tidak
		93,32	0	-0,06	-0,12	Tidak	Ya	1,85	Tidak
		94,1	0	-0,02	-0,06	Tidak	Ya	1,92	Tidak
		95,71	0,02	0,13	0,01	Tidak	Ya	2,03	Tidak
		94,99	0,05	0,11	0,07	Tidak	Ya	1,48	Ya
		95,95	0,06	-0,06	-0,55	Tidak	Ya	1,14	Ya



Senyawa 35	1,37	95,40	0,01	0,01	-0,05	Tidak	Ya	1,98	Tidak
Senyawa 36	1,17	95,18	0,05	0,18	-0,06	Tidak	Ya	1,52	Ya
Senyawa 37	0,75	95,82	0,02	-0,26	-0,63	Tidak	Ya	1,95	Tidak
Senyawa 38	1,51	94,45	0,15	-0,05	0,04	Tidak	Ya	1,82	Tidak
Senyawa 39	1,14	92,78	0	-0,09	-0,19	Tidak	Ya	1,85	Tidak
Senyawa 40	1,52	97,96	0,30	-0,01	0,28	Tidak	Tidak	1,51	Ya
Senyawa 41	1,10	97,23	0,23	-0,47	-0,71	Tidak	Ya	1,81	Ya
Senyawa 42	0,99	97,98	0,25	-0,39	-0,46	Tidak	Ya	1,76	Ya
Senyawa 43	1,64	97,55	0,24	0,09	0,23	Tidak	Tidak	0,57	Tidak
Senyawa 44	1,80	95,48	0,18	0,13	0,07	Tidak	Ya	0,7	Tidak
Senyawa 45	1,15	98,13	0,26	-0,26	-0,45	Tidak	Ya	1,88	Tidak
Senyawa 46	1,08	80,74	0,27	-0,54	-0,92	Tidak	Ya	1,94	Ya
Senyawa 47	1,21	81,94	0,25	-0,41	-0,91	Tidak	Ya	1,88	Tidak
Senyawa 48	1,43	94,31	0,15	-0,06	0,22	Tidak	Ya	1,37	Tidak
Senyawa 49	1,43	94,80	0,24	0,01	0,21	Tidak	Ya	1,36	Tidak
Senyawa 50	1,43	95,14	0,22	0,31	0,59	Tidak	Ya	1,15	Tidak
Senyawa 51	1,44	96,54	0,12	0,21	-0,12	Tidak	Ya	1,4	Ya
Senyawa 52	1,50	96,20	0,22	0,16	-0,10	Tidak	Ya	1,4	Ya
Senyawa 53	0,10	96,08	0,29	-0,24	-0,71	Tidak	Ya	1,41	Tidak
Senyawa 54	1,40	95,83	0,28	0,05	0,25	Tidak	Tidak	1,45	Ya
Senyawa 55	0,88	95,78	0,20	-0,30	-0,70	Tidak	Ya	1,41	Ya
Senyawa 56	1,44	94,47	0,23	0,02	0,21	Tidak	Ya	1,36	Tidak
Senyawa 57	1,40	96,22	0,31	0,07	0,23	Tidak	Tidak	1,43	Tidak
Senyawa 58	1,41	97	0,20	-0,05	0,14	Tidak	Tidak	1,44	Ya
Senyawa 59	0,74	92,11	0,10	-0,11	-0,51	Tidak	Ya	1,14	Tidak
Senyawa 60	1,21	95,71	0	0,07	-0,07	Tidak	Ya	0,86	Tidak
Senyawa 61	1,31	90,34	0	0,31	0,86	Tidak	Ya	1,80	Tidak
Senyawa 62	1,38	90,87	0	0,32	0,88	Tidak	Ya	1,42	Tidak
Senyawa 63	1,41	94,58	0,32	-0,75	0,20	Tidak	Tidak	1,7	Tidak
Senyawa 64	0,73	74,41	0,13	-0,54	-1,55	Tidak	Ya	2	Ya
Senyawa 65	1,30	93,65	0,11	-0,85	-0,50	Tidak	Ya	1,55	Tidak

Tabel 18. Hasil Prediksi Profil Toksisitas Senyawa Golongan Terpenoid.

Senyawa	Toksisitas		
	Tes Ames	Genotoksik	Non-genotoksik
Caulerpenin	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 13	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 14	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 15	Tidak	Ya	Ya
	Tidak	Tidak	Tidak
	Tidak	Tidak	Tidak
	Tidak	Tidak	Tidak
	Tidak	Ya	Tidak
	Tidak	Ya	Tidak
	Tidak	Ya	Tidak
	Tidak	Tidak	Tidak



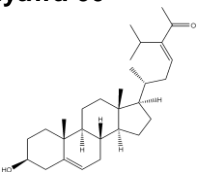
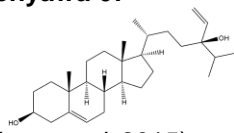
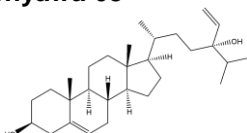
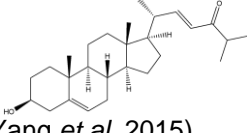
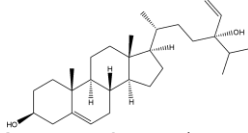
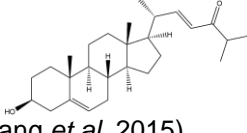
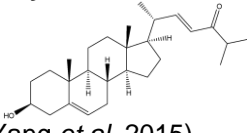
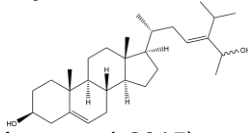
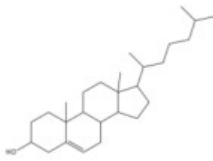
Optimization Software:
www.balesio.com

Senyawa 23	Tidak	Ya	Ya
Senyawa 24	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 25	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 26	Tidak	Ya	Ya
Senyawa 27	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 28	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 29	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 30	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 31	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 32	Tidak	Ya	Ya
Senyawa 33	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 34	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 35	Tidak	Ya	Ya
Senyawa 36	Tidak	Ya	Ya
Senyawa 37	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 38	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 39	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 40	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 41	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 42	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 43	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 44	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 45	Tidak	Ya	Ya
Senyawa 46	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 47	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 48	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 49	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 50	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 51	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 52	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 53	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 54	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 55	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 56	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 57	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 58	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 59	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 60	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 61	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 62	Tidak	Ya	Ya
	Tidak	Tidak	Tidak
	Tidak	Ya	Ya
	Tidak	Tidak	Tidak

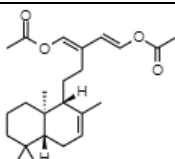


2.4 Golongan Steroid

Tabel 19. Senyawa Golongan Steroid dan Turunannya yang Terkandung Dalam *Caulerpa* sp.

<p>Senyawa 66</p>  <p>(Yang <i>et al.</i> 2015)</p> <p>SMILES: <chem>[H][C@@]1(CC[C@@]2([H])[C@]3([H])CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4C[C@@]3([H])CC[C@]12C)[C@H]CC=C(/CCC)CC=O</chem></p>	<p>Senyawa 67</p>  <p>(Yang <i>et al.</i> 2015)</p> <p>SMILES: <chem>[H][C@@]1(CC[C@@]2([H])[C@]3([H])CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4C[C@@]3([H])CC[C@]12C)[C@H]CCC[C@](O)(C=C)CCC</chem></p>	<p>Senyawa 68</p>  <p>(Yang <i>et al.</i> 2015)</p> <p>SMILES: <chem>[H][C@@]1(CC[C@@]2([H])[C@]3([H])CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4C[C@@]3([H])CC[C@]12C)[C@H]CCC[C@](O)(C=C)CCC</chem></p>
<p>Senyawa 69</p>  <p>(Yang <i>et al.</i> 2015)</p> <p>SMILES: <chem>[H][C@@]1(CC[C@@]2([H])[C@]3([H])CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4C[C@@]3([H])CC[C@]12C)[C@H]C\C=C\C(=O)CC</chem></p>	<p>Senyawa 70</p>  <p>(Yang <i>et al.</i> 2015)</p> <p>SMILES: <chem>[H][C@@]1(CC[C@@]2([H])[C@]3([H])CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4C[C@@]3([H])CC[C@]12C)[C@H]CCC\C(=C/C)CCC</chem></p>	<p>Senyawa 71</p>  <p>(Yang <i>et al.</i> 2015)</p> <p>SMILES: <chem>[H][C@@]1(CC[C@@]2([H])[C@]3([H])CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4C[C@@]3([H])CC[C@]12C)[C@H]CCC[C@]1(O[C@H]1)CCC</chem></p>
<p>Senyawa 72</p>  <p>(Yang <i>et al.</i> 2015)</p> <p>SMILES: <chem>[H][C@@]1(CC[C@@]2([H])[C@]3([H])CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4C[C@@]3([H])CC[C@]12C)[C@H]CCC</chem></p>	<p>Senyawa 73</p>  <p>(Yang <i>et al.</i> 2015)</p> <p>SMILES: <chem>[H][C@@]1(CC[C@@]2([H])[C@]3([H])CC=C4C[C@@H](O)CC[C@]4C[C@@]3([H])CC[C@]12C)[C@H]CC=C(/CCC)CCO</chem></p>	<p>Senyawa 74</p>  <p>(Rochfort <i>et al.</i>, 1996)</p> <p>SMILES: <chem>CCCCCCCC1CCC2C1(CCC3C2CC=C4C3(CCC(C4)O)C)C</chem></p>
	<p>Senyawa 76</p>	<p>Senyawa 77</p>

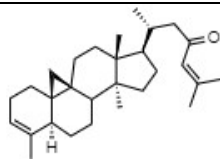




(Scheuer dan Higa, 1987)

SMILES:

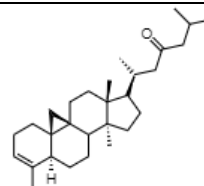
```
[H]C1(CC\C(=C/OCC=O)\C=C\OCC=O)CC=CC[C@]2([H])CCCC[C@]12C
```



(Scheuer dan Higa, 1987)

SMILES:

```
C[C@@]12[C@](CC[C@@H]2[C@@H](CC/C=CC/C=O)C)CC3CC[C@@]4([H])CC=CCC[C@@]4(C5)[C@]35C1
```

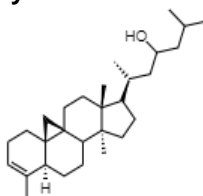


(Scheuer dan Higa, 1987)

SMILES:

```
C[C@]12[C@]C(C3CC[C@@]4(CC=CCC[C@@]45C[C@]53CC2)[H])CC[C@H]1CCCC(CCCC)=O
```

Senyawa 78

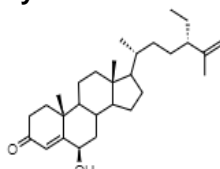


(Scheuer dan Higa, 1987)

SMILES:

```
C[C@]12[C@]C(C3CC[C@@]4(CC=CCC[C@@]45C[C@]53CC2)[H])CC[C@H]1CCCC(O)CCCC
```

Senyawa 79

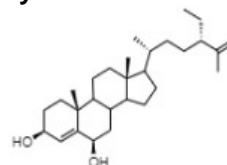


(Rochfort *et al.*, 1996)

SMILES:

```
O=C1CC[C@@]2CC([C@@H](O)CC3C2CC[C@@]4CC3CCC4[C@H]C[C@H](CC)CC=C)C1
```

Senyawa 80

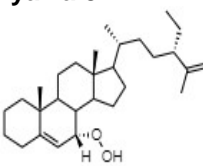


(Rochfort *et al.*, 1996)

SMILES:

```
CC[C@@H](CC[C@@H]CC1CCC2C3C[C@@H](O)C4=C[C@@H](O)CC[C@]4CC3CC[C@]12C)C=C
```

Senyawa 81

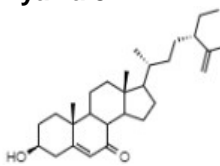


(Rochfort *et al.*, 1996)

SMILES:

```
CC[C@H](CC=C)CC[C@@]1([C@@]4(C)CC2C3C[C@@]4([C@@]12)C)C
```

Senyawa 82

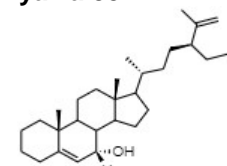


(Rochfort *et al.*, 1996)

SMILES:

```
C[C@H](CC[C@H](CC)CC=C)C1CCC2C3C(C=C4C[C@@H](O)CC[C@@]4(C3CC[C@@]21C)C)C=O
```

Senyawa 83

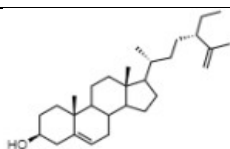


(Rochfort *et al.*, 1996)

SMILES:

```
C[C@@H](C1CCC2C3C[C@@H](O)C=C4CCCC[C@@]4CC3CC[C@@]21C)C[C@@H](CC=C)CC
```





(Rochfort *et al.*, 1996)

SMILES:

```
C[C@H](CC[C@H](CC)
CC=C)C1CCC2C3CC=
C4C[C@@H](O)CC[C
@@]4(C3CC[C@@]21
C)C
```

Tabel 20. Hasil Prediksi *Drug-likeness* Senyawa Golongan Steroid dari SwissADME.

Senyawa	Lipinski	Ghose	Veber	Egan	Muegge
Senyawa 66	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 67	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 68	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 69	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 70	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 71	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 72	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 73	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 74	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 75	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 76	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 77	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 78	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 79	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 80	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 81	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 82	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 83	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak
Senyawa 84	Ya	Tidak	Ya	Tidak	Tidak

Tabel 21. Hasil Prediksi *Drug-likeness* Senyawa Golongan Steroid dari ADMETLab 2.0.

Senyawa	NP Score	Lipinski	Pfizer	GSK	Golden Triangle
Senyawa 66	2.59	Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 67		Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 68		Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 69		Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 70		Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 71		Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 72		Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 73		Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 74		Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 75		Ya	Tidak	Tidak	Tidak



Optimization Software:
www.balesio.com

Senyawa 74	2,53	Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 75	2,36	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 76	3,38	Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 77	3,17	Ya	Tidak	Tidak	Ya
Senyawa 78	3,12	Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 79	2,56	Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 80	2,98	Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 81	2,96	Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 82	2,92	Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 83	2,87	Ya	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 84	2,84	Ya	Tidak	Tidak	Tidak

Tabel 22. Hasil Prediksi Profil Farmakokinetika Senyawa Golongan Steroid dari ADMETLab 2.0.

Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme			Ekskresi
	Caco-2	HIA (%)	Fu (%)	VD	BBB	CYP 2C9	CYP 2D6	CYP 3A4	Total klirens
Senyawa 66	-4,66	>30	1,28	1,11	Tidak	Tidak	Tidak	Ya	5,30
Senyawa 67	-4,63	>30	1,60	1,16	Ya	Tidak	Ya	Ya	6,10
Senyawa 68	-4,57	>30	1,36	1,10	Ya	Tidak	Tidak	Ya	7,82
Senyawa 69	-4,56	>30	2,09	1,05	Ya	Tidak	Ya	Tidak	17,46
Senyawa 70	-4,63	>30	1,72	1,57	Ya	Tidak	Ya	Ya	6,45
Senyawa 71	-4,66	>30	1,66	1,35	Tidak	Tidak	Ya	Ya	7,35
Senyawa 72	-4,63	>30	1,60	1,42	Tidak	Tidak	Ya	Ya	1
Senyawa 73	-4,61	>30	1,53	1,19	Ya	Tidak	Ya	Ya	5,78
Senyawa 74	-4,73	>30	1,74	1,85	Ya	Ya	Tidak	Tidak	15,75
Senyawa 75	-4,77	>30	12	1,11	Ya	Ya	Ya	Tidak	2,15
Senyawa 76	-4,94	>30	2,17	1,62	Tidak	Tidak	Tidak	Ya	14,45
Senyawa 77	-4,83	>30	1,58	1,34	Ya	Tidak	Tidak	Ya	17,22
Senyawa 78	-4,70	>30	1,63	1,48	Ya	Tidak	Tidak	Ya	17,39
Senyawa 79	-4,83	>30	1,51	1,37	Ya	Tidak	Ya	Ya	9,76
Senyawa 80	-4,69	>30	1,47	1,28	Tidak	Ya	Ya	Ya	8,48
Senyawa 81	-4,68	>30	1,51	2,08	Ya	Ya	Ya	Ya	4,89
Senyawa 82	-4,80	>30	1,92	0,88	Ya	Tidak	Ya	Ya	8,25
Senyawa 83	-4,67	>30	1,36	2,02	Ya	Ya	Ya	Ya	6,72
Senyawa 84	-4,67	>30	1,36	2,09	Ya	Tidak	Ya	Ya	8,75

Tabel 23. Hasil Prediksi Profil Farmakokinetika Senyawa Golongan Steroid dari pkCSM.

Senyawa	Absorpsi		Distribusi			Metabolisme		Ekskresi	
	HIA (%)	Fu (%)	VD	BBB	CYP 2D6	CYP 3A4	Total klirens	OCT2 Substrat	
Senyawa 66	96,94	0	0,07	-0,20	Tidak	Ya	0,53	Tidak	
Senyawa 67	95,53	0	-0,08	-0,23	Tidak	Ya	0,67	Tidak	
Senyawa 68	95,53	0	-0,08	-0,23	Tidak	Ya	0,67	Tidak	



Optimization Software:
www.balesio.com

Senyawa 69	1,46	97,87	0	0,01	-0,11	Tidak	Ya	0,57	Tidak
Senyawa 70	1,29	96,41	0	0,19	0,81	Tidak	Ya	0,62	Tidak
Senyawa 71	1,34	97,51	0	0,13	-0,08	Tidak	Ya	0,50	Tidak
Senyawa 72	1,34	97,51	0	0,13	-0,08	Tidak	Ya	0,50	Tidak
Senyawa 73	1,25	94,42	0	0,05	-0,24	Tidak	Ya	0,62	Tidak
Senyawa 74	1,21	93,72	0	0,38	0,76	Tidak	Ya	0,60	Tidak
Senyawa 75	1,16	95,58	0	0,10	0,13	Tidak	Ya	0,86	Ya
Senyawa 76	1,19	98,36	0	-0,05	0,83	Tidak	Ya	0,30	Tidak
Senyawa 77	1,22	99,85	0	-0,98	0,86	Tidak	Ya	0,30	Tidak
Senyawa 78	1,38	97,40	0	-0,45	0,83	Tidak	Ya	0,35	Tidak
Senyawa 79	1,35	97,90	0	-0,13	-0,20	Tidak	Ya	0,63	Tidak
Senyawa 80	1,34	95,55	0	-0,12	-0,10	Tidak	Ya	0,70	Tidak
Senyawa 81	1,37	93,41	0	-0,71	0,77	Tidak	Ya	0,75	Tidak
Senyawa 82	1,21	96,37	0	0,09	-0,34	Tidak	Ya	0,62	Tidak
Senyawa 83	1,38	97,78	0	-0,50	0,86	Tidak	Ya	0,68	Tidak
Senyawa 84	1,21	95,15	0	0,29	0,77	Tidak	Ya	0,67	Tidak

Tabel 24. Hasil Prediksi Profil Toksisitas Senyawa Golongan Steroid.

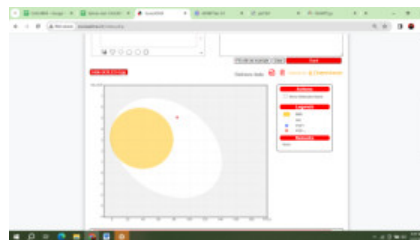
Senyawa	Toksisitas		
	Tes Ames	Genotoksik	Non-genotoksik
Senyawa 66	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 67	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 68	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 69	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 70	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 71	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 72	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 73	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 74	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 75	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 76	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 77	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 78	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 79	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 80	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 81	Ya	Ya	Tidak
Senyawa 82	Tidak	Ya	Tidak
Senyawa 83	Tidak	Tidak	Tidak
Senyawa 84	Tidak	Tidak	Tidak



Lampiran 3. Dokumentasi Penelitian



Gambar 16. Proses prediksi *drug-likeness* dari SwissADME



Gambar 17. Ilustrasi *Boiled-egg* dari SwissADME



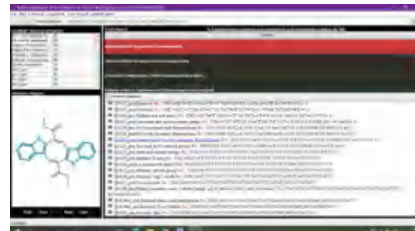
Gambar 18. Prediksi profil farmakokinetika dari pkCSM



Gambar 19. Prediksi profil farmakokinetika dari ADMETLab 2.0



Gambar 20. Prediksi situs metabolisme dari SMARTCyp



Gambar 21. Prediks toksisitas dari Toxtree

