

DAFTAR ISI

	Halaman
ABSTRAK.....	i
KATA PENGANTAR.....	iii
DAFTAR ISI.....	v
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR GAMBAR.....	ix
DAFTAR LAMPIRAN	xi
Bab I Pendahuluan.....	1
I.1 Latar belakang.....	1
I.2 Rumusan Masalah	4
I.3 Tujuan Penelitian	4
I.4 Waktu dan Tempat Penelitian.....	4
Bab II Tinjauan Pustaka.....	5
II.1 Diabetes Mellitus	5
II.2 Reseptor PPAR	14
II.3 Docking Molekular	16
II.4 Dinamika Molekuler	19
II.5 Protein Data Bank	20

Bab III Metodologi Penelitian.....	22
Bab IV Piranti Keras, Perangkat Lunak, dan Bahan	23
IV.1 Pirati Keras.....	23
IV.2 Perangkat Lunak.....	23
IV.3 Bahan	24
Bab V Prosedur Penelitian	25
V.1 Pencarian Struktur dan Binding site Reseptor	25
V.2 Persiapan Ligan.....	25
V.3 Penentuan Parameter Sifat Fisikokimia	25
V.4 Optimasi Geometri.....	26
V.5 Penentuan Parameter Fisikokimia Energi Ikatan (Highest Occupied Molecular Orbital dan Lowest Unoccupied Molecular Orbital).....	26
V.6 Validasi Metode Molecular Docking	26
V.7 Simulasi <i>Molecular Docking</i> Senyawa Uji	27
V.8 Simulasi <i>Molecular Dynamic</i> Senyawa Uji.....	27
V.9 Interpretasi Hasil	28
Bab VI Hasil dan Pembahasan.....	29
VI.1 Penelusuran Pustaka Struktur dan Preparasi Receptor Protein PPAR GAMMA	29

VI.2 Preparasi Ligan Uji.....	30
VI.3 Penentuan Parameter Sifat Fisikokimia.....	33
VI.4 <i>Molecular Docking</i>	40
VI.5 Simulasi <i>Molecular Dynamic</i> Senyawa Uji Terbaik.....	47
Bab VII Kesimpulan dan Saran.....	64
VII. 1 Kesimpulan.....	64
VII. 2 Saran.....	65
DAFTAR PUSTAKA.....	66

DAFTAR TABEL

Tabel II. 1	Perbandingan Perbedaan DM tipe 1 dan 2 DM Tipe 1 DM Tipe 2	12
Tabel VI. 1	Pustaka Struktur Reseptor Protein PPAR- γ	29
Tabel VI. 2	Pemodelan Struktur 2D PPAR- γ dengan Menggunakan ChemBioDraw	30
Tabel VI. 3	Parameter Sifat Fisikokimia Ligan Uji	35
Tabel VI. 4	Total Energi Ligan Uji Hail Optimasi Geometri.....	37
Tabel VI. 5	HOMO, LUMO dan Gap Energy Ligan Uji	38
Tabel VI. 6	Grid Box Yang Digunakan Pada Saat Validasi.....	41
Tabel VI. 7	Interaksi Ikatan antara Ligan Alami dengan Reseptor Target PPAR γ	43
Tabel VI. 8	Energi Bebas Ikatan (ΔG) dan Konstanta Inhibisi (Ki) 46	
Tabel VI. 9	Urutan Ligan Uji Yang Akan Dilakukan Simulasi <i>Molecular Dynamic</i>	48
Tabel VI. 10	Hasil perhitungan MM/GBSA	62
Tabel VI. 11	ΔG Total Hasil Dinamika molekular dan ΔG Hasil Molekular <i>Docking</i>	62

DAFTAR GAMBAR

Gambar II. 1 Mekanisme Resistensi Insulin	14
Gambar II. 2 Docking ligan molekul kecil (coklat) ke reseptor protein (hijau) untuk menghasilkan kompleks.	17
Gambar VI. 1 Komplek Protein 3LMP (kiri) dan ligan alami (kanan)	29
Gambar VI. 2 Visualisasi Hasil Re-docking	42
Gambar VI. 3 Grafik RMSD Protein Tunggal	51
Gambar VI. 4 Grafik RMSD Protein Tunggal (warna biru) dan Protein yang Terkompleks dengan Ligan Alami (warna orange)	52
Gambar VI. 5 Grafik RMSD Protein Tunggal (warna biru) dan Protein yang Terkompleks dengan Ligan Uji 2 (warna kuning)	53
Gambar VI. 6 Grafik RMSD Protein Tunggal (warna biru) dan Protein yang Terkompleks dengan Ligan Uji 5 (warna hijau)	54
Gambar VI. 7 Grafik RMSD Protein Tunggal (warna biru) dan Protein yang Terkompleks dengan Ligan Uji 11 (warna merah)	55
Gambar VI. 8 Grafik RMSD Protein Tunggal (warna biru) dan Protein yang Terkompleks dengan Ligan Uji 7 (warna coklat)	56
Gambar VI. 9 Grafik RMSD Protein Tunggal (warna biru) dan Protein yang Terkompleks dengan Ligan Uji 9 (warna magenta)	57

Gambar VI. 10 Grafik RMSD Protein Tunggal (warna biru) dan Protein yang Terkompleks dengan Ligan Alami (warna orange), Ligan Uji 2 (warna abu-abu), Ligan Uji 5 (warna kuning), Ligan Uji 11 (warna biru muda), Ligan Uji 7 (warna hijau), dan Ligan Uji 9 (warna ungu).....	58
Gambar VI. 11 Grafik RMSF senyawa alami (warna biru), Senyawa Uji 2 (warna orange), Senyawa Uji 5 (warna abu-abu), Senyawa Uji 11 (warna kuning), Senyawa Uji 7 (warna biru muda), dan Senyawa Uji 9 (warna hijau).....	60

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. 1 Gambar Visualisasi Interaksi Hasil Docking dan Tabel Interaksi Hasil Docking Senyawa Uji 1	71
Lampiran 1. 2 Gambar Visualisasi Interaksi Hasil Docking dan Tabel Interaksi Hasil Docking Senyawa Uji 2	73
Lampiran 1. 3 Gambar Visualisasi Interaksi Hasil Docking dan Tabel Interaksi Hasil Docking Senyawa Uji 3	75
Lampiran 1. 4 Gambar Visualisasi Interaksi Hasil Docking dan Tabel Interaksi Hasil Docking Senyawa Uji 4	77
Lampiran 1. 5 Gambar Visualisasi Interaksi Hasil Docking dan Tabel Interaksi Hasil Docking Senyawa Uji 5	79
Lampiran 1. 6 Gambar Visualisasi Interaksi Hasil Docking dan Tabel Interaksi Hasil Docking Senyawa Uji 6	81
Lampiran 1. 7 Gambar Visualisasi Interaksi Hasil Docking dan Tabel Interaksi Hasil Docking Senyawa Uji 7	83
Lampiran 1. 8 Gambar Visualisasi Interaksi Hasil Docking dan Tabel Interaksi Hasil Docking Senyawa Uji 8	85
Lampiran 1. 9 Gambar Visualisasi Interaksi Hasil Docking dan Tabel Interaksi Hasil Docking Senyawa Uji 9	87
Lampiran 1. 10 Gambar Visualisasi Interaksi Hasil Docking dan Tabel Interaksi Hasil Docking Senyawa Uji 10	89
Lampiran 1. 11 Gambar Visualisasi Interaksi Hasil Docking dan Tabel Interaksi Hasil Docking Senyawa 11	91
Lampiran 2. 1 Visualisasi Molekular Dinamik Senyawa Alami	93
Lampiran 2. 2 Visualisasi Molekular Dinamik Senyawa uji 2	94
Lampiran 2. 3 Visualisasi Molekular Dinamik Senyawa uji 5	95

Lampiran 2. 4 Visualisasi Molekular Dinamik Senyawa uji 11	96
Lampiran 2. 5 Visualisasi Molekular Dinamik Senyawa uji 7	97
Lampiran 2. 6 Visualisasi Molekular Dinamik Senyawa uji 9	98