

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN.....	i
SURAT PERNYATAAN.....	ii
ABSTRAK.....	iii
KATA PENGANTAR	iv
DAFTAR ISI.....	v
DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI.....	viii
DAFTAR TABEL.....	ix
DAFTAR LAMPIRAN.....	x
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG	xi
BAB I. PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar belakang.....	1
1.2 Rumusan masalah.....	3
1.3 Tujuan dan manfaat penelitian.....	3
1.4 Hipotesis penelitian.....	3
1.5 Tempat dan waktu Penelitian.....	3
BAB II. TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Diabetes Melitus.....	4
2.1.1 Prevalensi Diabetes Melitus.....	4
2.1.2 Klasifikasi dan Etiologi.....	5
2.1.2.1 Diabetes Tipe 1.....	6
2.1.2.2 Diabetes Tipe 2.....	6
2.1.2.3 Diabetes Melitus Gestasional.....	7
2.1.2.4 Diabetes Jenis Khusus Lainnya.....	7
2.1.3 Patofisiologi Diabetes Melitus Tipe 2.....	7

2.2 α -glukosidase.....	8
2.3 Inhibitor α -glukosidase.....	9
2.4 Tinjauan Tentang Kenikir (<i>Cosmos caudatus</i>).....	10
2.4.1 Klasifikasi.....	10
2.4.2 Morfologi.....	11
2.4.3 Khasiat.....	11
2.4.4 Kandungan Kimia.....	12
2.5 <i>Computer Aided Drug Design</i> (CADD)	17
2.6 <i>Structure Base Drugs Design</i> (SBDD).....	18
2.7 <i>Molecular Docking</i>	18
2.7.1 Optimasi Geometri.....	19
2.7.3 Parameter <i>Docking</i>	19
2.8 Dinamika Molekul.....	20
2.8.1 Parameter Simulasi Dinamika Molekul.....	21
BAB III. METODOLOGI PENELITIAN	22
BAB IV. PROSEDUR PENELITIAN	23
4.1 Alat.....	23
4.1.1 Hardware.....	23
4.1.2 Software.....	23
4.2 Bahan.....	23
4.2.1 Struktur Kristal Subunit N-terminal Human <i>Maltase-Glucoamylase</i> dalam Kompleks dengan <i>Acarbose</i>	23
4.3. Preparasi Protein Target.....	24
4.4 Preparasi Ligan.....	24
4.5 Validasi Metode <i>Docking</i>	25
4.6 <i>Molecular Docking</i>;	25

4.7 Molecular Dynamics Simulation.....	25
BAB V. HASIL DAN PEMBAHASAN.....	26
5.1 Preparasi Protein Target.....	26
5.2 Preparasi Ligan.....	26
5.2.1 Parameter Fisikokimia (<i>Lipinski's Rule of Five</i>).....	27
5.2.1.1 Bobot Molekul.....	29
5.2.1.2 LogP.....	29
5.2.1.3 Akseptor-Donor Ikatan Hidrogen.....	29
5.2.2 Optimasi Geometri.....	30
5.2.2.1 HOMO-LUMO dan energi gap.....	32
5.3 Validasi Docking.....	33
5.4 Docking Senyawa Uji.....	35
5.5 Simulasi Dinamika Molekul.....	38
5.5.1 RMSD.....	40
5.5.2 RMSF.....	43
5.5.3 Ikatan Hidrogen.....	45
5.5.4 MMGBSA.....	46
BAB VI. KESIMPULAN DAN SARAN.....	48
6.1 Kesimpulan.....	48
6.2 Saran.....	48
DAFTAR PUSTAKA	49
LAMPIRAN.....	57

DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI

Gambar 2.1 Prevalensi Diabetes di Indonesia	5
Gambar 2.2 Tanaman Kenikir (<i>Cosmos caudatus</i>).....	10
Gambar 2.3 Klasifikasi <i>Computer Aided Drug Design</i> (CADD)	17
Gambar 4.1 Kode PDB 2QMJ.....	23
Gambar 5.1 Kode PDB 2QMJ dan Acarbose.....	26
Gambar 5.2 Interaksi Validasi <i>Docking</i> Acarbose Dengan Protein	33
Gambar 5.3 Visualisasi Tumpang Tindih Ligan Alami Dan Hasil Validasi <i>Docking</i> ...	34
Gambar 5.4 Visualisasi Interaksi LU14 Dengan Protein	37
Gambar 5.5 Grafik RMSD.....	40
Gambar 5.6 Grafik RMSF.....	43

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Klasifikasi Dan Etiologi Diabetes Melitus.....	5
Tabel 2.2 Kandungan Kimia Daun Kenikir (<i>Cosmos caudatus</i>).....	12
Tabel 5.1 <i>Lipinski's Rule of Five</i>	27
Tabel 5.2 Optimasi Geometri.....	34
Tabel 5.3 Validasi Metode Docking.....	33
Tabel 5.4 Hasil <i>Docking</i> Pembanding dan Senyawa Uji.....	35
Tabel 5.5 Nilai Rata-Rata RMSD dan Rentang RMSD.....	42
Tabel 5.6 Nilai RMSF Terhadap Residu Asam Amino.....	44
Tabel 5.7 Okupansi Ikatan Hidrogen Tertinggi.....	45
Tabel 5.8 Hasil Perhitungan MMGBSA.....	46

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1: Kandungan Kimia Daun Kenikir (<i>Cosmos caudatus</i>)	57
Lampiran 2: Interaksi Hasil <i>Docking</i>	63
Lampiran 3: Ikatan Hidrogen	69
Lampiran 4: Turnitin	71
Lampiran 5: Daftar Riwayat Hidup	72
Lampiran 6: Kartu Bimbingan.....	73

DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG

SINGKATAN	NAMA
IDF	<i>International Diabetes Federation</i>
AGI	<i>Alpha-Glucosidase Inhibitor</i>
GI	Gastrointestinal
SCFA	<i>Short Chain Fatty Acid</i>
WHO	<i>World Health Organization</i>
DM	Diabetes Melitus
T2DM	Type 2 Diabetes Mellitus
GDM	Gestational Diabetes Mellitus
IR	Insulin Resistance
AGEs	<i>Advanced Glycation End Products</i>
T2D	Type 2 Diabetes
PKC	Protein Kinase C
MAPK	<i>Mitogen-Activated Protein Kinase</i>
MGAM	<i>Maltase-Glucoamylase</i>
SI	<i>Sucrase-Isomaltase</i>
GH31	<i>Glycoside Hydrolase Family 31</i>
GLP-1	<i>Glucagon-like Peptide-1</i>
HbA1c	<i>Hemoglobin A1C</i>
CO ₂	<i>Carbon Dioxide</i>
CADD	<i>Computer Aided Drug Design</i>
SBDD	<i>Structure-Based Drug Design</i>
LBDD	<i>Ligand-Based Drug Design</i>
VS	<i>Virtual Screening</i>
QSAR	<i>Quantitative Structure-Activity Relationship</i>
NMR	<i>Nuclear Magnetic Resonance</i>
3D	Tiga Dimensi
SF	<i>Scoring Function</i>
Ki	Konstanta Inhibisi
MD	Molecular Dynamics
RMSD	<i>Root Mean Square Deviation</i>
RMSF	<i>Root Mean Square Fluctuation</i>
MMGBSA	<i>Molecular Mechanics Generalized Born Surface Area</i>
DFT	<i>Density Functional Theory</i>