

DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR.....	i
DAFTAR ISI.....	ii
DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI	iv
DAFTAR TABEL	v
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG	vii
Bab I. Pendahuluan	1
I.1. Latar Belakang.....	1
I.2. Rumusan Masalah.....	3
I.3. Tujuan dan Manfaat Penelitian.....	3
I.4. Hipotesis Penelitian	3
I.5. Tempat dan Waktu Penelitian	3
Bab II. Tinjauan Pustaka	4
II.1. Sistem Imun	4
II.1.1. Sistem Imun Alami (<i>non-spesifik</i>).....	4
II.1.2. Sistem Imun Dapatan (Spesifik)	5
II.1.3. Komponen Seluler.....	5
II.2. Immunomodulator.....	10
II.3. Anggur (<i>Vitis vinifera</i> L).....	11
II.4. Flavonoid.....	12
II.5. Proantosianidin	13
II.6. Resveratrol	14
II.7. Toll-like receptors (TLRs).....	15
II.8. Computer Aided Drug Design (CADD).....	16
II.9. Parameter Sifat Fisikokimia	16
II.9.1. Bobot Molekul.....	16
II.9.2 Log P	16
II.9.3. MR.....	17
II.9.4. Donor Ikatan Hidrogen dan Akseptor Ikatan Hidrogen	17
II.10. Penambatan molekul	17
II.10.1 AutoDock.....	17
II.10.2 Validasi penambatan molekul.....	18
II.11. Dinamika molekul	18
II.11.1. AMBER	19
II.11.2. Topologi	19

II.11.3. RMSD.....	20
II.11.4. RMSF	20
II.11.5. MMGBSA.....	20
Bab III. Metodologi Penelitian.....	21
Bab IV. Prosedur Penelitian	22
IV.1. Persiapan Ligan	22
IV.2. Persiapan Reseptor	22
IV.3. Validasi Penambatan Molekul	22
IV.4. Penambatan Molekul.....	22
IV.5. Dinamika Molekul.....	23
BAB V. Hasil dan Pembahasan	24
V.1 Sifat Fisikokimia Senyawa Uji.....	24
V.2 Struktur Reseptor dan Ligan Alami.....	25
V.3 Hasil Validasi Penambatan Molekul	26
V.4 Hasil Simulasi Penambatan Molekul Senyawa Uji	28
V.5 Simulasi Dinamika Molekul.....	31
BAB VI. Kesimpulan dan Saran	37
VI. 1. Kesimpulan.....	37
VI. 2. Saran	37
DAFTAR PUSTAKA	38
LAMPIRAN	43

DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI

Gambar 2. 1. Mekanisme Imunitas Alami dan Adaptif	4
Gambar 2. 2. Buah Anggur	12
Gambar 2. 3. Struktur Quercetin, Myricetin, dan Kaempferol.....	13
Gambar 2. 4. Struktur Proanthocyanidins.....	14
Gambar 2. 5 Struktur Kimia Resveratrol (cis-Resveratrol dan trans-Resveratrol)	15
Gambar 5. 1 Makromolekul 6NIG.....	25
Gambar 5. 2 Ligan Alami 6N1G.....	26
Gambar 5. 3 Visualisasi tumpang tindih ligan alami hasil penambatan molekul (biru) dan Kristalografi sinar x (hijau).....	26
Gambar 5. 4 Grafik RMSD 6NIG & Diprovocim selama 100 ns	32
Gambar 5. 5 Grafik RMSD 6NIG & Proanthocyanidin selama 100 ns	32
Gambar 5. 6. Grafik RMSD 6NIG & Procyanidin selama 100 ns	33
Gambar 5. 7 Grafik perbandingan RMSD sistem kompleks ligan uji dan ligan pembanding selama 100 ns.....	33
Gambar 5. 8 Grafik RMSF.....	35

DAFTAR TABEL

Tabel 5. 1 Nilai Sifat Fisikokimia Buah Anggur	24
Tabel 5. 2 Hasil Validasi Docking.....	27
Tabel 5. 3 Hasil Simulasi Docking	28
Tabel 5. 4 Interaksi Residu Dengan Ligan Uji.....	29
Tabel 5. 5 Pergerakan Rata-rata Deviasi dan Rentang RMSD	33
Tabel 5. 6 Nilai RMSF Ligan Terhadap Asam Amino Toll-like receptor II	35
Tabel 5. 7 Hasil Perhitungan MMGBSA.....	36

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Struktur 2D dan 3D Senyawa Uj	43
Lampiran 2 Visualisasi 2D dan 3D Interaksi Senyawa Uji.....	46
Lampiran 3 Hasil cek plagiarisme	50
Lampiran 4 Surat Pernyataan.....	Error! Bookmark not defined.

DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG

SINGKATAN	NAMA
WHO	<i>World Heart Organization</i>
SARS-CoV-2	<i>Severe Acide Respiratory Syndrome Corona Virus 2</i>
PHEIC	<i>Public Health Emergency of International Concern</i>
COVID-19	<i>Corona Virus Disease 19</i>
RNA	<i>Ribonucleic Acid</i>
PAMPs	<i>pathogen-associated molecular patterns</i>
TLRs	<i>Toll-like Receptors</i>
TLR2	<i>Toll-like Receptor II</i>
HDL	<i>High Density Lipoprotein</i>
LDL	<i>Low Density Lipoprotein</i>
CRP	<i>C-Reactive Protein</i>
NK	<i>Natural Killer</i>
MHC	<i>Major Histocompatibility Complex</i>
APC	<i>Antigen Precenting Cell</i>
Ig	<i>Imunoglobulin</i>
NF-Kb	<i>Nuclear factor-Kb</i>
MMPs	<i>Metalloproteinase matriks</i>
AMPK	<i>Intercellular adhesion molecule</i>
SIRT1	<i>Sirtuin type</i>
TNF- α	<i>Tumor necrosis factor-alpha</i>
PGC-1 α	<i>Peroxisome proliferator-activated receptor-γcoactivator 1α</i>
IGF-1	<i>Insulin-like growth factor 1</i>
IGFBP-3	<i>Insulin-likegrowth factor-binding protein</i>
RASSF-1 α	<i>Ras association domain family 1 isoform A</i>
VEGF	<i>Vascularendothelial growth factor</i>
COX-2	<i>Cyclooxygenase 2</i>
Nrf2	<i>Nuclear factor erythroid 2</i>
Keap1	<i>Kelch-like ECH-associated protein 1</i>
ICAM	<i>Intercellular adhesion molecule</i>
VCAM	<i>Vascular cell adhesion molecule</i>