

DAFTAR ISI

HALAMAN PERSEMBAHAN	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN.....	iii
HALAMAN PERSETUJUAN	iv
KATA PENGANTAR.....	v
DAFTAR ISI.....	vii
DAFTAR GAMBAR.....	ix
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
ABSTRAK	xii
ABSTRACT	xiii
BAB I.....	1
PENDAHULUAN.....	1
1.1. Latar Belakang	1
1.2. Rumusan Masalah	3
1.3. Tujuan Penelitian	3
1.4. Manfaat Penelitian	3
BAB II	4
TINJAUAN PUSTAKA.....	4
2.1. Diabetes Melitus.....	4
2.2. Patofisiologi Diabetes Melitus	5
2.3. Terapi Farmakologi dan Non Farmakologi.....	7
2.4. Tanaman Pacing (<i>Costus Speciosus</i>).....	9
2.5. Inhibitor Alfa Glukosidase.....	11
2.6. Computer-Aided Drug Design (CADD)	11
2.7. Optimasi Geometri	12
2.8. Sifat Fisiko Kimia	12
2.9. Density Functional Theory (DFT)	13
2.10. Molecular Docking.....	14
2.11. Validasi Molecular Docking	14
2.12. Autodock.....	15

2.13. Dinamika Molecular.....	15
BAB III.....	16
METODE PENELITIAN	16
3.1. Tempat dan Waktu Penelitian	16
3.2. Metode Pengumpulan Data	16
3.3. Analisis Data	17
3.4. Prosedur Penelitian.....	17
3.4.1.Alat.....	17
3.4.1.1. Perangkat Keras	17
3.4.1.2. Perangkat Lunak.....	17
3.4.2.Bahan.....	17
3.4.3.Persiapan Reseptor	18
3.4.4.Persiapan Ligan Uji	18
3.4.5.Optimasi Geometri.....	18
3.4.6.Simulasi Penambatan Molekul	19
3.4.6.1. Validasi metode penambatan molekul	19
3.4.6.2. Docking senyawa uji	19
3.4.7.Simulasi Dinamika Molekul	20
BAB IV	21
HASIL DAN PEMBAHASAN	21
4.1 Preparasi Ligan Uji.....	21
4.2 Parameter Sifat Fisikokimia	21
4.3 Persiapan Reseptor	23
4.4 Optimasi Geometri	24
4.5 Validasi Docking	24
4.6 Penambatan molekul ligan uji pada protein alfa glukosidase	26
BAB V.....	40
KESIMPULAN DAN SARAN	40
DAFTAR PUSTAKA	41

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Tanaman Pacing (<i>Costus Speciosus</i>) (Erlangga 2020).....	9
Gambar 4.1 Struktur Reseptor Antidiabetes type II	23
Gambar 4.2 Grafik RMSD ligan alami selama 100 ns	30
Gambar 4.3 Grafik RMSD ligan d2	31
Gambar 4.4 Grafik RMSD ligan d4	32
Gambar 4.5 Grafik RMSD ligan d24	34
Gambar 4.6 Grafik RMSF Ligan Alami.....	35

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Klasifikasi Diabetes Melitus	4
Tabel 2.2 The Egregious Eleven	5
Tabel 4.1 Hasil analisis senyawa berdasarkan Lipinski	22
Tabel 4.2 Validasi Metode Penambatan Molekul	25
Tabel 4.3 Hasil Penambatan Ligan Uji.....	27
Tabel 4.4 Hasil Analisis Ikatan Hidrogen	37
Tabel 4.5 Hasil Analisis MMGBSA.....	38

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Daftar Ligan Uji dan Ligan Alami.....	46
Lampiran 2 Struktur 2D dan 3D Ligan Uji dan Ligan Alami	49
Lampiran 3 Visualisasi Hasil Penambatan Molekul Ligan Uji.....	58
Lampiran 4 Hasil cek plagiarisme.....	79
Lampiran 5 kartu bimbingan	80
Lampiran 6 Curriculum vitae	81