

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN	i
HALAMAN PERNYATAAN PLAGIASI	ii
HALAMAN PERSETUJUAN.....	iii
KATA PENGANTAR.....	iv
DAFTAR ISI.....	vi
DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI	iv
DAFTAR TABEL	vi
DAFTAR SINGKATAN	ix
DAFTAR LAMPIRAN.....	xi
ABSTRAK.....	xi
ABSTRAC	xv
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah.....	3
1.3 Tujuan Peneltian	3
1.4 Manfaat Peneltian	3
1.5 Hipotesis Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1 Depresi.....	5
2.1.1 Pengertian Depresi	5
2.1.2 Patofisiologi Depresi	6
2.1.3 Etiologi Depresi.....	7
2.1.4 Epidemiologi Depresi	7
2.1.5 Gejala Depresi	8
2.1.6 Pengobatan Depresi	9
2.1.7 Klasifikasi Antidepresan.....	9
2.2 Reseptor Serotonin 5-HT	12
2.3 Tanaman <i>Leea aequata</i> . L	13

2.3.1 Morfologi Tanaman <i>Leea aequata</i> . L	14
2.3.2 Kandungan Kimia Tanaman <i>Leea aequata</i> . L	15
2.3.3 Aktivitas Farmakologi Tanaman <i>Leea aequata</i> .L	15
2.4 Penambatan Molekul	16
2.4.1 Parameter Penambatan Molekul	17
2.4.2 Simulasi Dinamika Molekul	18
2.4.3 Parameter Simulasi Dinamika Molekul	18
BAB III METODOLOGI PENELITIAN	20
BAB VI PROSEDUR PENELITIAN	20
4.1 Alat	20
4.1.1 Perangkat Keras	20
4.1.2 Perangkat Lunak	20
4.2 Bahan	20
4.3 Prosedur Penelitian	20
4.3.1 Preparasi Protein Target.....	20
4.3.2 Preparasi Ligan	21
4.3.3 Optimasi Geometri.....	21
4.3.4 Metode Validasi Penambatan Molekul	21
4.3.5 Penambatan Molekul Senyawa Uji	21
4.3.6 Analisis dan Hasil Penambatan Molekul	21
4.3.7 Simulasi Dinamika Molekul	22
4.3.8 Analisis Simulasi Dinamika Molekul	22
4.4 Tahapan Simulasi Dinamika Molekul.....	22
4.4.1 Penyiapan Berkas	22
4.4.2 Topologi	22
4.4.3 Solvasi	23
4.4.4 Netralisasi	23
4.4.5 Minimalisasi Energi.....	23
4.4.6 Ekulibrasi.....	23
4.4.7 Produksi.....	23
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN	24

5.1	Persiapan Protein Target	24
5.2	Persiapan Ligan Uji	25
5.3	Optimasi Geometri.....	26
5.4	Validasi Penambatan Molekul	30
5.5	Penambahan Molekul	33
5.6	Simulai Dinamika Molekul.....	36
5.7	Analisis Hasil Simulasi Dinamika Molekul	38
5.7.1	<i>Root Mean Square Deviation (RSMD)</i>	38
5.7.2	<i>Root Mean Square Fluctation (RMSF)</i>	41
5.7.3	<i>Molecular Mechanics Generalized Born Surface Area (MMGBSA)</i>	42
5.7.4	Analisis Ikatan Hidrogen	44
BAB VI KESIMPULAN		46
6.1	Kesimpulan.....	46
6.2	Saran	46
DAFTAR PUSTAKA.....		47
LAMPIRAN.....		54

DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI

Gambar 1. Mekanisme Depresi	5
Gambar 2. Patofisiologi Depresi	7
Gambar 3. <i>Leea aequata</i> .L (S. Islam, 2017).....	14
Gambar 4 (a) <i>Sodium-dependent serotonin transporter</i> (escitalopram) dan (b) ligan alami	24
Gambar 5 Visualisasi overlay ligan alami kristalografi dan ligan alami hasil penambatan ulang.....	31
Gambar 6 Visualisasi interaksi reseptor 5-HT dengan ligan alami hasil kristalografi (a) dan setelah penambatan ulang (b)	32
Gambar 7 Visualisasi Interaksi Ligan Uji LU18 Hasil Penambatan Molekul	35
Gambar 8 Grafik RMSD (a) Ligan Alami (b) Ligan Uji 18 (c) Ligan Uji 31 (d) Ligan Uji 35 (e) Ligan Uji 26 (f) Ligan Uji 27.....	38
Gambar 9 Grafik RMSF (a) Ligan Alami (b) Ligan Uji 18 (c) Ligan Uji 31 (d) Ligan Uji 35 (e) Ligan Uji 26 (f) Ligan Uji 27.....	41

DAFTAR TABEL

Tabel 1 Hasil Optimasi Ligan Uji	28
Tabel 2 Parameter Validasi Metode Penambatan Molekul.....	30
Tabel 3 Hasil Penambatan Senyawa Uji dan Ligan Alami	34
Tabel 4 Hasil Perhitungan Energi MMGBSA	43
Table 5 Persentasi Okupansi Ikatan Hidrogen.....	44

DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG

SINGKATAN	NAMA
BDNF	<i>Brainderived Neurotrophic Factor</i>
GME	Gangguan Mental Emosional
WHO	<i>World Health Organitation</i>
SNRI	<i>Serotonin Norepinephrine Reuptake Inhibitors</i>
SSRI	<i>Selective Serotonin Reuptake Inhibitors</i>
5HT	Reseptor 5HT
NE	<i>Norepinephrine</i>
SERT	Serotonin Transporter
NET	<i>Norepinephrine Transporter</i>
GCPR	<i>G-Protein Coupled Receptors</i>
MD	<i>Molecular Dynamic</i>
HPA	<i>Hipotalamus Hipofisis Adrenal</i>
CRH	<i>Corticotropin Relasing Hormone</i>
DA	Dopamin
GABA	Asam Gamma-Aminobutirat
BDNF	<i>Brain Derived Neurotrophic Factor</i>
MDD	<i>Major Depressive Disorder</i>
SSP	Sistem Saraf Pusat
MAOI	<i>Monoamine Oxidase Inhibitor</i>
MAO	<i>Monoamine Oxidase</i>
TCA	Trisiklik
cAMP	Siklik Adenosin Monofosfat
Girk	<i>G-Protein-Gated Inwardly Rectifying K⁺</i>
NMR	<i>Nuclear Magnetic Resonance</i>
RA	<i>Roseoside A</i>
DPPH	<i>Diphenylpicrylhydrazil</i>
ROS	<i>Reactive Oxygen Species</i>
MK	Mekanika Kuantum
BM	Berat Molekul
Log P	Kofisien Partisi
RMSD	<i>Root Mean Square Deviantion</i>
ΔG	Energi Bebas Ikatan
Ki	Konstanta Penghambatan
FRET	Transfer Energi Resonansi Foster
EPR	<i>Electron Paramagnetic Resonance</i>
cryo-EM	<i>Mikroskop Cryoelektron</i>
RMSF	<i>Root Mean Square Fluctuation</i>
MMGBSA	<i>Molecular Mechanics Generalized Born Surface Area</i>
GB	<i>Generalized Born</i>
PDB	Protein Data Bank
2D	Dua Dimensi
3D	Tiga Dimensi

DTF
DSV

Density Functional Theory
Discovery Studio Visualizer

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Hasil Turnitin.....	54
Lampiran 2 Kartu Bimbingan	55
Lampiran 3 Senyawa Kimia Tanaman <i>Leea Aequata</i> . L	57
Lampiran 4 CV	66