

DAFTAR ISI

ABSTRAK.....	i
ABSTRACT	ii
KATA PENGANTAR.....	iii
DAFTAR ISI	v
DAFTAR LAMPIRAN	vii
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL.....	ix
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar belakang	1
I.2 Rumusan masalah	3
I.3 Tujuan penelitian	3
I.4 Hipotesis.....	3
I.5 Waktu dan tempat penelitian.....	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	4
II.1 Diabetes melitus	4
II.2 Enzim <i>DPP4</i>	5
II.2.1 Mekanisme enzim <i>DPP4</i> terhadap diabetes.....	6
II.3 <i>Andrographis Paniculata</i>	7
II.4 Optimasi Geometri.....	7
II.5 <i>Docking</i>	8
II.6.1 Parameter Analisis <i>Docking</i>	8
II.6 Simulasi Dinamika Molekul.....	8
II.6.1 Parameter Analisis Dinamika Molekul	9
BAB III METODOLOGI PENELITIAN.....	11
BAB IV PROSEDUR PENELITIAN	12

IV.1	Preparasi Ligan Uji	12
IV.2	Preparasi Target Uji	12
IV.3	Penentuan Parameter Fisikokimia	12
IV.4	Validasi Lokasi Penambatan Ligan	12
IV.5	Simulasi Penambatan Ligan Uji	12
IV.6	Simulasi Dinamika Molekul Ligan-Reseptor.....	13
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN		14
V.1	Ligan uji	14
V.2	Enzim target	19
V.3	Parameter sifat fisikokimia.....	21
V.5	Penambatan ligan uji.....	25
V.6	Dinamika Molekul	28
V.6.1	Analisis RMSD Ligan-Reseptor	28
V.6.2	Analisis RMSF Ligan-Reseptor	30
V.6.3	Analisis MM/PBSA dan MM/GBSA Ligan-Reseptor	32
BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN.....		33
VI.1	Kesimpulan.....	33
VI.2	Saran	33
DAFTAR PUSTAKA		34

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Senyawa Uji.....	37
Lampiran 2 Penambatan Ulang Ligan Alami.....	40
Lampiran 3 Interaksi Senyawa Uji – Target Uji.....	43
Lampiran 4 Tabel Interaksi Reseptor-Ligan	45

DAFTAR GAMBAR

Gambar II.1. Enzim DPP4 (a) dan Ligan alami kode LF7 (b)	6
Gambar V.2. Enzim DPP-4 kode PDB 6B1E. (A) dan Ligan alami vildagliptin (LF7) (B) (Berger dkk., 2017)	19
Gambar V.3 Overlay redocking ligan alami. Warna merah menunjukkan ligan alami sebelum redocking dan warna biru menunjukkan ligan alami setelah di redocking (A) Interaksi antara ligan alami dengan target hasil redocking (B)	23
Gambar V.4 Interaksi antara ligan alami dengan target hasil redocking	24
Gambar V.5 Visualisasi Interaksi Senyawa Uji – Target Uji	27
Gambar V.6 RMSD Ligan Alami LF7(a), Ligan L1 (b), dan Ligan L2 (c)	29
Gambar V.7 RMSF Ligan Alami, Ligan L1, dan Ligan L3	30

DAFTAR TABEL

Tabel V. 1 Ligan uji – senyawa terpen dan flavonoid tanaman sambiloto (Okhwarobo dkk., 2014).	15
Tabel V.2 Analisis sifat fisikokimia ligan uji.....	21
Tabel V.3 Energi Hasil Redocking ligan alami	23
Tabel V.4 Energi Bebas Ikatan (ΔG) dan Konstanta Inhibisi (KI) Penambatan Ligan Uji - Reseptor.....	25
Tabel V.5 Interaksi Ligan Alami-Reseptor	31
Tabel V.6 Nilai Energi Ikatan	32