

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN	i
ABSTRAK	ii
KATA PENGANTAR	iv
DAFTAR ISI	v
DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI	vii
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR LAMPIRAN	ix
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG	x
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. <i>Mycobacterium Tuberculosis</i>	4
II.2. Patogenesis Penyakit Tuberkulosis	8
II.3. Terapi Tuberkulosis	10
II.4. Obat Anti Tuberkulosis Pilihan Pertama	11
II.5. Kulit Buah Naga (<i>Hylocereus polyrhizus</i>)	14
II.6. Enzim <i>InhA</i>	17
II.7. Parameter Sifat Fisikokimia	17
II.8. <i>Density Functional Theory (DFT)</i>	18
II.9. Penambatan Molekul	18
II.10. Dinamika Molekuler (<i>Molecular Dynamic</i>)	21
BAB III. METODOLOGI PENELITIAN	25
BAB IV. ALAT DAN BAHAN	26
IV.1. Alat	26
IV.1.1. Perangkat Keras	26
IV.1.2. Perangkat Lunak	26
IV.2. Bahan	26

BAB V. PROSEDUR PENELITIAN	28
V.1. Penulusuran Pustaka Senyawa Uji	28
V.2. Persiapan Ligan Uji	28
V.3. Persiapan Protein Target.....	28
V.4. Validasi Penambatan Molekul.....	28
V.5. Simulasi Penambatan Molekul.....	29
V.6. Simulasi Dinamika Molekul.....	29
BAB VI. HASIL DAN PEMBAHASAN	31
VI.1. Ligan Uji.....	31
VI.2. Struktur Makromolekul	33
VI.3. Validasi Penambatan Molekul.....	33
VI.4. Simulasi Penambatan Molekul.....	37
VI.5. Simulasi Dinamika Molekul.....	39
BAB VII. KESIMPULAN	46
VII.1. Kesimpulan	46
VII.2. Saran	46
DAFTAR PUSTAKA	47
LAMPIRAN.....	51

DAFTAR GAMBAR DAN ILUSTRASI

Gambar II.1. Gambaran skema dinding sel mikobakteri	5
Gambar II.2. <i>Mycobacterium Tuberculosis</i>	7
Gambar II.3. Obat lini pertama untuk terapi Tuberkulosis	11
Gambar VI.1. (a) Molekul Protein 2AQ8, (b) Ligan alami dengan kode <i>NADH</i>	33
Gambar VI.2. Hasil overlay tumpang tindih ligan alami dan ligan alami <i>redocking</i>	35
Gambar VI.3. Hasil visualisasi interaksi reseptor <i>InhA</i> dengan Ligan alami <i>NADH</i>	36
Gambar VI.4. Grafik Overlay RMSD Ligan Alami, Ligan Uji, dan Ligan Pembanding	40
Gambar VI.5. Grafik visualisasi fluktuasi ikatan residu – ligan	42

DAFTAR TABEL

Tabel II.1. Obat Lini Pertama dalam pengobatan Tuberkulosis	12
Tabel IV.1. Senyawa Uji Kulit Buah Naga.....	26
Tabel VI.1. Hasil Skrining Sifat Fisikokimia Ligan Uji	31
Tabel VI.2. Parameter Validasi Metode Penambatan Molekul.....	34
Tabel VI.3. Interaksi reseptor <i>InhA</i> (2AQ8) dengan ligan alami <i>NADH</i>	35
Tabel VI.4. Hasil Penambatan Molekul Ligan Uji	38
Tabel VI.5. Hasil Pergerakan Rentang RMSD	41
Tabel VI.6. Tabel Hasil Perhitungan Energi dengan MMGBSA.....	43
Tabel VI.7. Tabel Hasil Perhitungan Energi dengan MMPBSA	44

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Kandungan Senyawa dalam Kulit Buah Naga	51
Lampiran 2. Interaksi Hasil Penambatan Molekul dari Ligan Alami, Ligan Uji, dan Ligan Pembanding	53
Lampiran 3. Visualisasi Interaksi Ligan dan Makromolekul	57
Lampiran 4. Grafik <i>RMSD</i> Hasil Simulasi Dinamika Molekul	60

DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG

Singkatan	Nama
ABTS	<i>2,2'-Azino-bis-3-ethylbenzothiazoline-6-sulphonic</i>
BTA	Bakteri tahan asam
DPPH	<i>2,2-difenil-1-pikrilhidrazil</i>
EMB	Etambutol
HPLC	<i>High Performance Liquid Chromatography</i>
HPLC-PDA	<i>High Performance Liquid Chromatography-photodiode array detector</i>
INH	Isoniazid
<i>INHA</i>	<i>Nadh- dependent enoyl-acp reductase</i>
LTBI	<i>Latent Tuberculosis Infection</i>
MD	<i>Molecular Dinamic</i>
MDR-TB	<i>Multi Drugs Resistant-Tuberculosis</i>
MMGBSA	<i>Molecular Mechanics Generalized Born Surface Area</i>
MTB	<i>Mycobacterium Tuberculosis</i>
OAT	Obat Anti Tuberkulosis
PBC	<i>Periodic Boundary Conditions</i>
PDB	<i>Protein Data Bank</i>
PCR	<i>Polymerase Chain Reaction</i>
PIM	<i>Phosphatidyl Inositol Mannoside</i>
RIF	Rifampisin
RMSD	<i>Root Mean Square Deviation</i>
RMSF	<i>Root Mean Square Fluctuation</i>
TBC	Tuberkulosis
WHO	<i>World Health Organization</i>