

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	iii
PERSETUJUAN.....	iv
KATA PENGANTAR.....	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR TABEL.....	x
DAFTAR LAMPIRAN	xi
ABSTRAK	xii
ABSTRACT	xiii
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan Penelitian.....	2
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	3
2.1 Hipertensi	3
2.1.1 Definisi Hipertensi.....	3
2.1.2 Klasifikasi Hipertensi	3
2.1.3 Terapi non-Farmakologi.....	4
2.1.4 Terapi Farmakologi Hipertensi.....	4
2.2 Reseptor.....	4
2.3 Daun Senggani (Melastoma malabathricum L).....	5
2.3.1 Klasifikasi dan Morfologi Daun Senggani	5
2.4 Computer-Aided Drug Design (CADD).....	6
2.5 Optimasi Geometri	7
2.6 Parameter Sifat Fisiko Kimia	7
2.7 Density Functional Theory (DFT)	7
2.8 Penambatan Molekul	8

2.9	Validasi <i>Molecular Docking</i>	8
2.10	AutoDock	9
2.11	Molecular Dynamika (MD)	9
2.11.1	Tahapan Molekuler Dinamik	10
2.11.2	Parameter simulasi Molecular Dynamic	11
2.11.3	Assisted Model Building with Energy Refinement (AMBER)	11
2.12	Lipinski rule of five (RO5)	12
BAB III	METODOLOGI PENELITIAN	13
3.1	Waktu Dan Tempat Penelitian	13
3.2	Subjek Penelitian	13
3.3	Metode Pengumpulan Data	13
3.4	Analisis data	14
3.5	Prosedur penelitian	14
3.5.1	Alat	14
3.5.2	Bahan	14
3.5.3	Persiapan Reseptor	15
3.5.4	Persiapan Ligan Uji	15
3.5.5	Optimasi Geometri	15
3.5.6	Simulasi Penambatan Molekul	16
3.5.7	Simulasi Dinamika Molekul	16
BAB IV	HASIL DAN PEMBAHASAN	18
4.1	Persiapan Reseptor	18
4.2	Persiapan Ligan Uji	18
4.3	Validasi metode docking	19
4.4	Simulasi Dinamika Molekul	24
4.4.1	RMSD Protein-Ligan Alami	24
4.4.2	RMSD protein-ligan ds5	25
4.4.3	RMSD protein-ligan ds20	26
4.4.4	RMSD Protein-Ligan ds34	27
4.4.5	RMSF Protein-Ligan	29

4.4.6 Ikatan Hidrogen (% okupansi).....	30
4.4.7 MMGBSA	31
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	33
5.1 Kesimpulan	33
5.2 Saran.....	33
DAFTAR PUSTAKA	34
LAMPIRAN.....	36

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1.	Daun Senggani (<i>Melastoma malabathricum</i> L).....	5
Gambar 2.	Makromolekul dan Ligan Alami.....	18
Gambar 3.	Visualisasi Tumpang Tindih Ligan Alami AnCE	19
Gambar 4.	Fluktuasi hasil RMSD ligan alami.....	24
Gambar 5.	Fluktuasi Hasil RMSD Ligan DS5	25
Gambar 6.	Fluktuasi hasil RMSD ligan DS20.....	26
Gambar 7.	Fluktuasi hasil RMSD DS34	27
Gambar 8.	Hasil RMSF	29

DAFTAR TABEL

Tabel 1.	Klasifikasi Tekanan Darah Klinik Klasifikasi ESH-ESC.....	3
Tabel 2.	Parameter Validasi <i>Docking</i> Ligan Alami	19
Tabel 3.	Penambatan Molekul	21
Tabel 4.	Hasil Ikatan Hidrogen	30
Tabel 5.	Hasil MMGBSA	31

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Senyawa Kimia yang Terkandung dalam Daun Senggani.....	37
Lampiran 2. Struktur 2D dan 3D Senyawa Uji.....	39
Lampiran 3. Visualisasi 2D Ligan Alami dan Ligan Uji	51
Lampiran 4. Konformasi Struktur Senyawa.....	61
Lampiran 5. Turnitin	69
Lampiran 6. Kartu Bukti Bimbingan	70
Lampiran 7. Biodata.....	71