

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN	i
HALAMAN PERNYATAAN	ii
HALAMAN PERSETUJUAN	iii
KATA PENGANTAR	iv
DAFTAR ISI.....	vi
DAFTAR GAMBAR.....	viii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG	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 dan manfaat penelitian	3
1.4 Hipotesis penelitian.....	3
1.5 Tempat dan waktu Penelitian	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	4
2.1 Hipertensi.....	4
2.1.1 Etiologi Hipertensi	5
2.1.2 Patofisiologi.....	6
2.1.3 Terapi Pada Penyakit Hipertensi	7
2.2 Tanaman Kersen (<i>Muntingia calabura L.</i>).....	8
2.2.1 Analisa morfologi tanaman kersen (<i>Muntingia calabura L.</i>)	9
2.2.2 Kandungan Senyawa Kersen.....	10
2.3 Angiotensin Converting Enzyme (ACE-1)	10
2.4 Computer Aided Drug Design (CADD)	12
2.4.1 Optimasi Geometri	12
2.4.2 Parameter Fisikokimia	12
2.4.3 Validasi Penambatan Molekul.....	13
2.5 Dinamika Molekul	13

2.5.1 Tahapan Simulasi Dinamika Molekul.....	14
2.5.2 Parameter Dinamika Molekul	15
BAB III METODOLOGI PENELITIAN	17
BAB VI PROSEDUR PENELITIAN	18
4.1 Alat.....	18
4.1.1 Perangkat Keras	18
4.1.2 Perangkat Lunak.....	18
4.2 Bahan	18
4.3 Persiapan Protein Target	18
4.4 Persiapan Ligan Uji.....	19
4.5 Optimasi Geometri dan Penentuan Parameter Sifat Fisikokimia	19
4.6 Validasi Metode Penambatan Molekul	19
4.7 Docking Senyawa Uji	20
4.8 Simulasi Dinamika Molekul	20
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN	21
5.1 Persiapan Protein Target	21
5.2 Persiapan Ligan Uji.....	22
5.3 Optimasi Geometri dan Analisis Parameter Sifat Fisikokimia.....	30
5.4 Validasi Metode Penambatan Molekul	36
5.5 Docking Senyawa Uji.....	39
5.6 Simulasi Dinamika Molekul	43
5.6.1 Analisis Rmsd (Root Mean Square Deviation).....	44
5.6.2 Analisis Rmsf (Root Mean Square Fluctuation)	46
5.6.3 Analisis Ikatan Hidrogen	48
5.6.4 Mmgbsa (Molecular Mechanics Generalized Born Surface Area)	49
BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN.....	51
DAFTAR PUSTAKA.....	52
LAMPIRAN	58

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1	Renin Angiotensin Aldosteron System.....	6
Gambar 2.2	Visualisasi Tanaman Kersen.....	8
Gambar 2. 3	Visualisasi Daun kersen.....	9
Gambar 5.1	(a) Struktur Kristalografi dari ACE dengan (b) Ligan Alami Lisinopril.....	21
Gambar 5.2	Visualisasi tumpang tindih ligan alami dengan hasil penambatan ulang (kuning) dan kristalografi sinar-X (hijau).....	37
Gambar 5.3	Visualisasi interaksi Angiotensin converting enzim dengan ligan alami.....	38
Gambar 5.4	Visualisasi Interaksi 2D dan 3D LU11.....	43
Gambar 5.5	Grafik RMSD enzim ACE-ligan selama 100 ns.....	45
Gambar 5.6	Grafik RMSF enzim ACE-ligan	47

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1	Agen Antihipertensi	7
Tabel 5.1	Senyawa Kimia yang berhasil dikumpulkan dari daun Kersen	23
Tabel 5.2	Optimasi Geometri.....	31
Tabel 5.3	Parameter Sifat Fisikokimia.....	33
Tabel 5.4	Parameter Validasi Metode Penambatan Molekul.....	36
Tabel 5.5	Hasil Penambatan Ligan	39
Tabel 5.6	Pergerakan Rata-rata Deviasi dan Rentang RMSD	44
Tabel 5.7	Okupansi Ikatan Hidrogen	48
Tabel 5. 8	Komponen Energi MMGBSA dari Kompleks-Ligan-Enzim	49

DAFTAR SINGKATAN DAN LAMBANG

Nama	Singkatan
ACE	<i>Angiotensin Converting Enzyme</i>
ACEi	<i>Angiotensin Converting Enzyme Inhibitor</i>
AMBER	<i>Assited Model Building with Energy Refinement</i>
WHO	<i>World Health Organization</i>
Riskesdas	<i>Riset Kesehatan Dasar</i>
DFT	<i>Density Functional Theory</i>
PDB	<i>Protein Data Bank</i>
HIS	<i>Histamine</i>
GLN	<i>Glutamine</i>
LYS	<i>Lysine</i>
TYR	<i>Tyrosine</i>
Ki	<i>Konstanta Inhibisi</i>
MMGBSA	<i>Molecular Mechanics Generalized Born Surface Area</i>
RMSD	<i>Root Mean Square Deviation</i>
RMSF	<i>Root Mean Square Fluctuation</i>
RSCB	<i>Research Collaboratory for Structure Biology</i>
ACC/AHA	<i>American College of Cardiology/American Heart Association</i>

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1	Visualisasi 2D 3D Interaksi Enzim-Ligan	58
Lampiran 2	Analisis Ikatan Hidrogen selama 100 ns (100000 ps).....	67
Lampiran 3	Kartu Bimbingan.....	68
Lampiran 4	Plagiarisme.....	69
Lampiran 5	Daftar Riwayat Hidup.....	70