

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	iii
HALAMAN PERNYATAAN PLAGIASI.....	iv
HALAMAN PERSETUJUAN PUBLIKASI ONLINE.....	v
KATA PENGANTAR	vi
DAFTAR ISI.....	viii
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL.....	xi
DAFTAR LAMBANG DAN SINGKATAN	xii
DAFTAR LAMPIRAN.....	xiii
ABSTRAK	xiv
ABSTRACT.....	xv
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan penelitian.....	3
1.4 Manfaat Penelitian.....	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	4
2.1 Pengertian Diabetes Mellitus.....	4
2.2 Patofisiologi.....	4
2.3 Klasifikasi Diabetes Mellitus	6
2.4 Gejala Klinis Diabetes Mellitus.....	6
2.5 Terapi Farmakologi	7
2.6 Klasifikasi Tumbuhan <i>Halimeda tuna</i>	7
2.7 Morfologi.....	8
2.8 Khasiat.....	9
2.9 Kandungan Senyawa	9
2.10 Enzim Alfa Amilase	12
2.11 <i>Lipinski Rule of Five</i>	13
2.12 Penambatan Molekul.....	14
2.13 Parameter Penambatan Molekul.....	15
2.14 Dinamika Molekul.....	17
2.15 Parameter Dinamika Molekul.....	17

BAB III METODE PENELITIAN.....	19
BAB IV PROSEDUR PENELITIAN	20
4.1 Alat	20
4.2 Bahan.....	20
4.3 Penambatan Molekul	20
4.4 Dinamika Molekul.....	24
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN.....	27
5.1 Preparasi Protein Target	27
5.2 Preparasi Ligan Uji.....	28
5.3 Optimasi Geometri	30
5.4 Validasi Penambatan Molekul.....	30
5.5 Penambatan Molekul	32
5.6 Dinamika Molekul.....	35
5.7 RMSD.....	36
5.6 RMSF	38
5.7 MMGBSA	39
BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN	41
6.1 Kesimpulan.....	41
6.2 Saran	41
DAFTAR PUSTAKA	42
LAMPIRAN.....	47

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1. Mekanisme kerja acarbose menghambat enzim alfa amilase dan alfa glukosidase pada sistem pencernaan (Uuh Narvaez & Segura Campos, 2022).	5
Gambar 2. Tanaman Halimeda tuna (frederic, 2023).....	8
Gambar 3. Struktur Kristalografi (PDB 2QV4) dan ligan alam (QV4).....	27
Gambar 4. Visualisasi tumpang tindih ligan alami Alfa amilase dengan hasil penambatan ulang (kuning) dan kristalografi sinar-X (hijau).	31
Gambar 5. Visualisasi interaksi ikatan ligan alami dari struktur 3D pdb dan ligan alami sesudah penambatan.....	32
Gambar 6. Visualisasi interaksi ligan uji SU32, SU34 dan SU33.....	35
Gambar 7. Fluktuasi hasil RMSD ligan alami dan ligan uji.....	37
Gambar 8. Fluktuasi residu disekitar atom pengikatan	38

DAFTAR TABEL

Tabel 1. Senyawa uji Alga hijau <i>Halimeda tuna</i>	9
Tabel 2. Sifat fisikokimia ligan alami dan ligan uji	28
Tabel 3. Parameter validasi penambatan molekul.....	31
Tabel 4. Hasil penambatan molekul	33
Tabel 5. Hasil perhitungan energi MMGBSA.....	40

DAFTAR LAMBANG DAN SINGKATAN

SINGKATAN	NAMA
WHO	<i>World Health Organization</i>
IDF	<i>International Diabetes Federation</i>
DM	Diabetes Mellitus
T2DM	Diabetes Mellitus Tipe 2
2D	Dua Dimensi
3D	Tiga Dimensi
BM	Berat Molekul
RMSD	<i>Root Mean Square Deviantion</i>
RMSF	<i>Root Mean Square Fluctuation</i>
MMGBSA	<i>Molecular Mechanics Generalized Born Surface Area</i>
PDB	<i>Protein Data Bank</i>
ΔG	Nilai Bebas Ikatan
KI	Konstanta Inhibisi
MMFF94	<i>Merck Molecular Force Field 94</i>

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Hasil Turnitin.....	47
Lampiran 2. Kartu Bimbingan	48
Lampiran 3. Senyawa 2D dan 3D senyawa Alga hijau Halimeda tuna	50
Lampiran 4. CV.....	60